فهرست مطالب

فهرست مطالب.....أ

فهرست اشکال .....ج

فصل ۱ Band SOLVE 1.2 .....۲

۱-۱ مقدمه ۲

۱-۲ تغییرات جدید در نسخه 1.2 .....۲

۱-۳ تغییرات جدید در نسخه های جدید.....۳

۱-۴ تذکرات ۴

۱-۴-۱ محدودیت ضمانت ۴

۱-۴-۲ سیستم مورد نیاز ۴

۱-۵ چگونه این راهنما را بخوانیم.....۴

۱-۵-۱ چه چیزی باید بخوانیم؟.....۴

۱-۵-۲ قراردادها ۴

۱-۵-۲-۱ قراردادهای فیزیک ۵

۱-۵-۲-۱-۱ پلاریزاسیون ۵

۱-۵-۲-۱-۲ نامگذاری باندها ۵

۱-۵-۲-۱-۳ قراردادهای راهنما ۵

فصل ۲ نصب ۷

۲-۱ نصب برنامه اصلی ۷

۲-۱-۱متغیرها ۷

۲-۱-۲ فایلهای خروجی Viewing 3D.....۷

۲-۳ تست نصب BandSOLVE.....۸

۲-۴ آگاه کردن BandSOLVE از نصب MayaVi.....۱۰

۲-۵ کاری که میتوان بعدا" انجام داد؟ ۱۲
فصل ۳ اولین گشت در BandSOLVE..... ۱۳
۳-۱مقدمه ۱۳
۳-۲ انتشار در موجبرکریستالهای فوتونی ۱۳
۳-۲-۱پشتیبانی مثالها ۱۳
۳-۲-۲ پیوند-T ۱۳
۳-۲-۳ توضیح نتایج..... ۱۶
۳-۳ کاربرد BandSOLVE ۱۷
فصل ۴ تئوری ساختارهای باند فوتونی ۲۱
۴-۱ هندسه ساختارهای پریودیک ۲۱
۴-۱-۱ شبکه وارون ۲۳
۶-۱-۲ اولین ناحیه بریلیون ۲۳
۴-۲ تئوری ساختارهای باند ۲۶
۴-۲-۱ قضیه بلاخ ۲۶
۴-۲-۲ فرمول بندی مقادیر ویژه معادلات ماکسول..... ۲۸
۴-۲-۳ ساختارهای باند، شکاف های باند ۲۹
۴-۲-۴دیاگرام های باند..... ۳۱
۴-۲-۵ ساختارهای باند کاهش یافته و کشیده شده..... ۳۱
۴-۳ قوانین مقیاس گذاری ۳۳
۴-۴ پلاریزاسیون ۳۳
۴-۵ زوجیت ۳۴
۴-۶ روش های عددی ۳۵
۴-۶-۱ محدودیت های PWE ۳۶
فصل ۵ رسم کردن ساختارهای متناوب در RSoft CAD..... ۳۷
۵-۱ مقدمه ۳۷
۵-۲ آرایه تسهیلات رسم و بردارهای شبکه در محیط ۳۷
۵-۲-۱ ایجاد یک آرایه شش ضلعی..... ۳۸
۵-۲-۲ شبکه های..... ۴۲

۵-۲-۳ فیبرهای کریستال فوتونی ۴۴
۵-۲-۴ انتخاب عناصر در لایه های چندگانه Y ۴۵
۵-۳ کشیدن ساختارهای 3D ۴۶
۵-۳-۱ شبکه های مربعی از کره ها ۴۷
۵-۳-۲ نمایش 3D index profile ۴۷
۵-۳-۳ شبکه FCC از مکعب ها ۴۸
۵-۳-۴ شبکه Woodpile ۴۸
۵-۴ تعیین ساختارهای متناوب ۵۰
۵-۴-۱ ساختن 1D user Profile ۵۰
۵-۴-۲ ساختن ۵۲
۵-۵ ..... ۵۳
۵-۶ استفاده بردارهای شبکه و جهت های مختصات به صورت مؤثر ۵۴
۵-۶-۱ تعریف بردارهای شبکه ۵۵
۵-۶-۲ متغیرهای دیگر ۵۵
۵-۶ ابزار تولید شبکه تعریف شده کاربر ۵۶
فصل ۶ استفاده Band SOLVE: ۵۸
ایجاد ساختارهای باند ۵۸
۶-۱ تولید ساختار باند ۵۸
۶-۱-۱ مرحله ۱: رسم یک طرح کریستال فوتونی ۵۹
۶-۱-۲ مرحله۲ : انتخاب ۶۰
۶-۱-۳ مرحله ۳ : انتخاب روش عددی ۶۰
۶-۱-۴ مرحله ۴ : انتخاب تعداد بعد ۶۱
۶-۱-۵ مرحله ۵ : تعریف خصوصیات شبکه ۶۲
۶-۱-۶ مرحله ۶ : رزولوشن شبکه وخصوصیات عددی ۶۶
۶-۱-۷ مرحله ۷ : انتخاب تعداد باندها ۶۷
۶-۱-۸ مرحله ۸: انتخاب بردار موج ۶۷
۶-۱-۹ مرحله ۹: انتخاب پلاریزاسیون محاسبات ۷۰
۶-۱-۱۰ مرحله ۱۰: فعال کردن خروجی مود و ویژگیهای دیگر ۷۱

۶-۱-۱۱ مرحله ۱۱: شروع محاسبات ۷۱
۶-۲ تنظیمات دیگر ۷۲
فصل ۷ استفاده BandSOLVE II: ۷۶
تحلیل و کنترل خروجی ۷۶
۷-۱ ساخت و نمایش پروفایل های مود ۷۶
۷-۱-۱ تولید ساختار باند ۷۷
۷-۱-۲ انتخاب مودها ۷۸
۷-۲ ویژگی های دیگر پنجره خروجی ۸۹
۷-۲-۱ Measurements and diagnostics ۸۹
فصل ۸ محاسبات ساختار باند FDTD استفاده شده در FullWAVE ۹۶
۸-۱ معرفی ۹۶
۸-۲ تکنیک عددی ۹۷
۸-۲-۱ شرایط مرزی متناوب در FDTD ۹۷
۸-۲-۲ پاسخ فرکانسی ۹۸
۸-۲-۳ رزولوشن فرکانسی و باندهای تقریباً- تبهگن ۹۹
۸-۲-۴ خصوصیات مود ۱۰۰
۸-۲-۵ محدودیت های جاری محاسبات باند FDTD ۱۰۰
۸-۳ خودآموز : ساختارهای باند ساده در FullWAVE ۱۰۰
۸-۳-۱ نصب ساختار PBG مربعی برای محاسبات FDTD ۱۰۱
۸-۳-۲ تنظیم شرایط اجرا ۱۰۳
۸-۳-۳ انتخاب بقیه تنظیمات FDTD ۱۰۴
۸-۳-۴ اجرای محاسبات باند ۱۰۶
۸-۳-۵ ساختار باند شبکه غیرمکعبی استفاده کننده FDTD ۱۰۸
۸-۳-۶ پارامترهای FDTD شبکه شش ضلعی ۱۱۱
۸-۳-۷ شبیه سازی مثال FDTD شش ضلعی ۱۱۲

فهرست اشکال

جدول ۱-۱ اسامی فایلهای اجرایی ٦
شکل۲-۱ پنجره Band solve ۸
شکل۲-۲ پارامترهای شبیه سازی ۹
شکل ۲-۳ دیاگرمهای ساختار باند ۱۰
شکل۲-۴ اولولیتها(preferences) ۱۱
شکل ۳-۱ کریستال فوتونی مستطیلی2D ۱٤
شکل ۳-۲ شبییه سازی ۱۵
شکل۳-۳ شبیه سازی ۱۵
شکل۳-۴ شبیه سازی ۱٦
شکل ۳-۵ تنظیمات مرکز شبکه ۱۸
شکل ۳-۶ توزیع ضریب شکست ۱۸
شکل ۳-۷ ساختار باند ۱۹
شکل ۳-۸ سختار باند ۲۰
شکل ۴-۱ ساختارهای پریودیک ۲۱
شکل ۴-۲ پایه های شبکه مربعی ۲۲
شکل ۴-۳ سلولهای واحد اولیه ۲۲
شکل ۴-۴ سلول واحد اولیه ۲۳

شکل ۴-۵ منحنی های پراش برای مودهای TM از موجبرهای صفحهای ۲٤
شکل ۴-۶ منحنی پراش برای مودهای شبکه 1D ۲٥
شکل ۴-۷ اولین ناحیه بریلیون ۲٦
شکل ۴-۸ صفحات فرکانسی شبکه مکعبی 2D (بالا TEوپایین TM) ۳۰
شکل ۴-۹ دیگرام های باند TM وTE برای شبکه مکعبی از میله ها در هوا ۳۱
شکل۴-۱۰ بالا- شکل شکاف مساله شبکه مکعبی 2D پایین- ساختار باند کاهش یافته ۳۲
جدول ۴-۱ روابط پریتی ۳٤
شکل ۵-۱ شبکه شش ضلعی در Rsoft CAD ۳۸
شکل ۵-۲ شکل آرایه در صفحه X-Z ۳۹
شکل ۵-۳ پارامترهای لنز های منفرد درآرایه شش ضلعی ٤۰
شکل ۵-۴ Index profile برای شبکه شش ضلعی X-Z ٤۲
شکل ۵-۵ خصوصیات طرح آرایه XY ٤۳
شکل۵-۶ شکلCAD برای آرایه شش ضلعی X-Y ٤٤
شکل ۵-۷ Index profile برای فیبر کریستال فوتونی شبکه شش ضلعی ٤٥
شکل ۵-۸ نمایش اولین سطح فیبرها در آرایه X-Y ٤٦
شکل ۵-۹ Index profile برای شبکه مکعی ساده از کره ها ٤۸
شکل ۵-۱۰ موجبر 1D profile ٥۱
شکل ۵- ۱۱ تنظیمات user profile ٥۲
شکل ۶-۱ طرح شش ضلعی 2D ٥۹
شکل ۶-۲ پنجره اصلی BandSOLVE ٦۱
شکل ۸-۳ تنظیمات شبکه عددی ٦۲
شکل ۶-۴ حوزه پیش فرض برای شبکه شش ضلعی ٦٤
شکل۶-۵ ..... ٦٥
شکل۶-۶ ..... ٦٦
شکل ۶-۷ تنظیم k path vector ٦۸
شکل ۶-۸ ناحیه بریلیون و kpath برای شبکه شش ضلعی 2D ٦۹
شکل ۶-۹ دیاگرام باند برای آرایه شش ضلعی2D ۷۲
شکل ۶-۱۰ تنظیمات مختلف BandSOLVE ۷۲
شکل۶-۱۱ Global preferences for BandSOLVE ۷٤
شکل۷-۱ ..... ۷٦
شکل۷-۲ ساختار باند شبکه مکعبی 2D ۷۷
شکل ۷-۳ پنجره تنظیم خروجی مود ۷۸

شکل ۷-۴ پنجره خروجی مود برای جداسازی حالت مرزی ۸۱
شکل ۷-۵ تظیمات مود خروجی مثال ۸۵
شکل ۷-۶ پنجره Mode VIEWER ۸۶
شکل ۷-۷ میدانهای D برای شبکه 2D در نقاط Γ ۸۸
شکل ۷-۸ مودهای 2D با تکرار ۳ ..... ۸۹
شکل ۷-۹ جدول Measurements از پنجره خروجی ۹۰
شکل ۸-۱ شرایط مرزی متناوب در محاسباتFDTD ۹۷
شکل۸-۲ طرح CAD برای محاسبات FDTD ۹۹
شکل۸-۳ مانیتور زمان و پاسخ طیفی از محاسبات FDTD ۹۹
شکل ۸-۴ Time monitor ۱۰۲
شکل۸-۵ شبکه مربعی ۱۰۳
شکل۸-۶ Launch Parameters ۱۰۴
شکل ۱۰-۷ FullWAVE settings ۱۰۶
شکل ۸-۸ BandSOLVE dialog ۱۰۷
شکل ۸-۸ ساختار باند ۱۰۷
شکل ۸-۹ Launch Parameter ۱۰۹
شکل۸-۹ BandSOLVE ۱۱۰
شکل۸-۱۰ View Domain ۱۱۰
شکل۸-۱۱ FullWAVE setting ۱۱۱
شکل ۸-۱۲ ..... ۱۱۱
شکل ۸-۱۳ ساختار باند ۱۱۲

فصل ۱ Band SOLVE 1.2

۱-۱ مقدمه

BandSOLVE، نرم افزار جامع و موتور شبیه سازی برای تولید و آنالیز ساختارهای باند فوتونی[1] است. این بخش از نرم افزار شبیه سازی بر پایه کاربرد بهینه پیشرفته برای تکنیک بسط موج صفحه ای[2] برای ساختارهای پریودیک بنا نهاده شده است. هدف BandSOLVE تولید ساختارهای باند برای ساختارهای شکاف باند[3] فوتونی نظیر موجبرهای کریستال فوتونی[4] 2D و 3D است. علاوه بر آن برای ساختارهای فیبر مثل فیبرهای کریستال فوتونی و فیبرهای شکاف باند فوتونی بکار می‌رود.

BandSOLVE شامل ابزارهای دیگر شبیه سازی RSoft نظیر BeamPROP و FullWAVE است. به ویژه BandSOLVE برای بهینه‌سازی مشخصه‌های ساختارهای باند کریستال فوتونی که بعداً در FullWAVE شبیه سازی می‌شود، برای امتحان خصوصیات وابسته به زمان، مثل تلفات موجبر و کوپلینگ[5] مفید است. این راهنما جزئیات ابزارهای طراحی را بیان می‌کند و اینکه ابزار بخصوصی استفاده شود.

توجه کنید برای استفاده BandSOLVE ، آشنایی با واسط BeamPROP به طور موثری مهم است. ابزار CAD که در راهنمای BeamPROP به طور کامل توضیح داده شده است در بسته BandSOLVE موجود است.

۱-۲ تغییرات جدید در نسخه ۱.۲

ویژگیهای جدید زیادی به نسخه 1.2 اضافه شده است.

- **Inversion symmetry**

BandSOLVE اکنون می تواند نتایج یکسانی را در نصف زمان ارائه دهد. Inversion symmetry در بیشتر ساختارهای مطرح شده معمولی به کار می‌رود.

- **Mode reseeding**

---

[1] Photonic band structure
[2] Plane-wave
[3] Bandgap
[4] Photonic crystal waveguides
[5] coupling

می توان نتایج نقاط K قبلی را برای مقادیر شروع حدس های اولیه برای اهداف[1] جدی به کار برد.

- **View Domain for individual tensor components**

با ساختارهای ناهمسانگرد[2]، اکنون انتخاب اجزا تانسور[3] که باید آشکار شود ممکن شده است.

- **New manual chapters and Tutorials**

فصلهای جدید اکنون استفاده از روش FDTD را برای BandSOLVE، نشان می‌دهد. آموزش جدید به آنالیز FDTD، کریستال های ناهمسانگرد، inversion symmetry و Mode reseeding اضافه شده است.

- **New output options**

انتخاب‌های جدیدی برای تغییر فرکانس که نمایش ساختار باند انعطاف‌پذیر است در کنترل نمایش ساختار باند وجود دارد. این انتخاب در اجتناب از کشیدن تأخیرها در مسائل بزرگ کمک می‌کند.

- **New preferences**

میزان رنگ ها برای رسم کردن فرم مودها استفاده می‌شود، که اکنون می‌تواند تنظیم شود.

- **Mode VIEWER enhancements**

Mode VIEWER اکنون خصوصیات فایل پیچیده و دلخواه را که استفاده می‌کند روابط معمولی را پشتیبانی می کند. تصاویر و انیمیشن ها خروجی در رنج فرمت های استاندارد می‌تواند شود.

۱-۳ تغییرات جدید در نسخه های جدید

برخی از اضافات BandSOLVE در اینجا لیست شده است.

- **Anisotropy**

BandSOLVE اکنون مواد با ناهمسانگردی دلخواه را پشتیبانی می کند.

- **New index generation system**

کد راهنما برای بازتاب بهتر توزیع ضریب شکست[4] دوباره به طور کامل نوشته شده است. جزئیات بخش Index cut Planes فصل ۴ موجود می باشد.

- **Tensorial index averaging**

Band Solve اکنون استفاده Tensorial averaging را پشتیبانی می‌کند.

- **More 1D geometries**

---

[1] seed
[2] anistropic
[3] tensor
[4] Index distribution

اکنون می توان مشکلات 1D را در طول هر محور x و y یا z حل کرد. قبلاً، فقط برش های جهت دار x را می‌شد آنالیز کرد.

- **Support for phatonic crystal slabs**

تعدادی ویژگی برای کمک به تحلیلهای صفحات کریستال فوتونی اضافه شده است. مدها اکنوان مـی تواند برای حذف حالتهای بالای خط نور صفحه فیلتر شود ، برای جزئیـات بخـش parity فصـل ۳ را ببینید.

۱-۴ تذکرات

۱-۴-۱ محدودیت ضمانت

نرم افزار برای ۳۰ روز رایگان است.

۱-۴-۲ سیستم مورد نیاز

Band Solve در IBM'PC با Intel Pentium یا بالاتر و 64MB یا بیشتر اجـرا مـی شـود. windows مورد نیاز، 98/ME یا NT/2000/xp است.

در 95 windows کار نمی‌کند. همچنین در Linux و Unix، بـا اسـتفاده Xwindows یـا Xfree86 و Motif اجرا می‌شود.

۱-۵ چگونه این راهنما را بخوانیم

شرح ذیل برخی راهنمایی ها راجع به محتوی راهنما را داراست.

۱-۵-۱ چه چیزی باید بخوانیم؟

به طور مختصر، شما باید هر چیزی که در این راهنما است را بخوانید.

شما باید فصل های ۱ و ۲ را برای اطمینان یـافتن از نصـب درسـت BandSOLVE و بدسـت آوردن برخی ادراک ها از این امکانات بخوانید، فصل ۳ شامل خلاصه تئوری BandSOLVE است.

۱-۵-۲ قراردادها[1]

این بخش قوانین مختلف در خصوص فیزیک و راهنما را توضیح می دهد.

[1] convention

۱-۵-۲-۱ قراردادهای فیزیک

مانند همه شاخه های علم، تعدادی مفهوم در مطالعه محاسبات ساختار برای هر تعریف وجود دارد. این قوانین پذیرفته شده در BandSOLVE است.

۱-۵-۲-۱-۱ پلاریزاسیون

مسائل کریستال های فوتونی دو بعدی، از نظر انتشار میدانها در صفحه شبکه، جداشدنی است و حل های TM و TE را پشتیبانی می کند.

- در BandSOLVE پلاریزاسیون TE نشان می دهد که نقاط میدان الکتریکی خروج از صفحه کامپیوتر است. پلاریزاسیون TM نشان می دهد که میدان الکتریکی در سطح صفحه کامپیوتر قرار گرفته است. قراردادهای BandSOLVE برای هماهنگی با تعریف BeamPRoP از TE و TM در موجبرهای نوری معمولی انتخاب می شود.

۱-۵-۲-۱-۲ نامگذاری باندها

- در BandSOLVE باندها از صفر به بالا شمارش می شوند.

بنابراین پایین ترین باند در ساختار باند، شماره صفر است. باند بعدی، باند شماره یک است. این قرارداد برای هماهنگی با BeamPROP انتخاب شده است. طبیعی است که فکر کنیم که حالت نخستین مودها، صفر است.

هنگام کارکردن با مقالات آگاه باشید که برخی نویسندگان پایین ترین باند را شماره ۱ فرض می کنند.

۱-۵-۲-۱-۳ قراردادهای راهنما

تعدادی از طرح حروف و قراردادهای رسم در زیر این راهنما آمده است:

- اعمال اجرا شده در BandSOLVE یا RSoft CAD معمولاً با عدد لیست شده است.
- اسامی میدانها و کنترل ها در GUI به صورت درشت نوشته شده است.
- مقادیر فهرست و کنترل های رادیویی با Romantalics نوشته شده است.
- متغییرها وفرمولهای جدول واصطلاحات GUL با courier نوشته شده است.
- در رجوع به مثالها، مسیر نصب برای ابزار RSoft CAD به طور ویژه به صورت <rsoft_dir> است و باید مقدار درست برای نصب شما جایگزین شود. در Windows به صورت نمونه c:\Rsoft است و در UNIX/Linux به صورت /user/local/rsoft می باشد.

فایــل هــای اجرایــی بــرای محصــولات مختلــف RSoft دارای اســامی مختلــف در windows و UNIX/Linux است. جدول زیر اسامی متناظر را که در UNIX/Linux استفاده می شود را دارد:

جدول ۱-۱ اسامی فایلهای اجرایی

محصولات	اسمWindows	اسمUNIX/Linux
RSoft CAD tool	bcadw32.exe	xbcad
BeamPROP simulation tool	bsimgui.exe	xbsim
FullWAVE simulation tool	fullwave.exe	xfullwave
BandSOLVE graphical simulation tool	bandsolve.exe	xbandsolve
BandSOLVE command line simulation tool	bandsolvecmd.exe	bandsolve
ModeVIEWER tool	modeviewer.exe	xmodeviewer
WinPLOT graphing tool	winplot.exe	xplot

فصل ۲ نصب

این فصل روش نصب BandSOLVE را توضیح می دهد.

۲-۱ نصب برنامه اصلی

همه فایل های وابسته به ابزار BandSOLVE به طور اتوماتیک با Rsoft Design Group Photonics CAD Suite نصب می شود.

۲-۱-۱متغیرها

- Rsoft_INIPATH

این متغیر مسیر برنامه شما و داده های دیگر ذخیره شده را نشان می دهد. به صورت پیش فرض محصولات Rsoft مسیر خانگی شما را برای ذخیره این داده استفاده خواهد کرد. در این حالت شما می توانید این متغیر را به موقعیت مناسب تنظیم کنید.

- Rsoft_EDITOR

این متغیر ویرایشگر متن را برای دیدن فایل های تولید شده به وسیله Rsoft نشان می دهد. مقدار پیش فرض notepad.exe است. این متغیر را تعریف کنید اگر شما ترجیح می دهید که فایل های متنی را با برنامه دیگری مثل wordpad.exe ببینید.

۲-۱-۲ فایلهای خروجی Viewing 3D

BandSOLVE می تواند فایل های خروجی توصیف کننده شبکه های 3D و توزیع میدان الکترومغناطیسی را گسترش دهد. این بسیار مفید است برای چک کردن اینکه طرح CAD، درست توصیف می کند ساختار 3D مطلوب را هنگامی که این ابزار در حالت آماده کردن است اما برای پشتیبانی یک منبع توانمند ناظر که به MayaVi معروف است را انتخاب می کنیم. این ابزار را می توان download و نصب کرد. برای یافتن MayaVi، به http://mayavi.sourceforge.net مراجعه کنید و دستورات گفته شده را اجرا کنید. بعد از نصب آن شما به نصب BandSOLVEبرای MayaVi نیاز پیدا خواهید کرد. این روند در In forming BandSOLVE of your MayaVi installation توضیح داده شده است.

تذکر: اگر شما به هر دلیلی MayaVi را نصب نکردید، BandSOLVE بدون هیچ مشکلی کار خواهد کرد فقط، برای تولید فایل های 3D ناتوان است.

۲-۳ تست نصب BandSOLVE

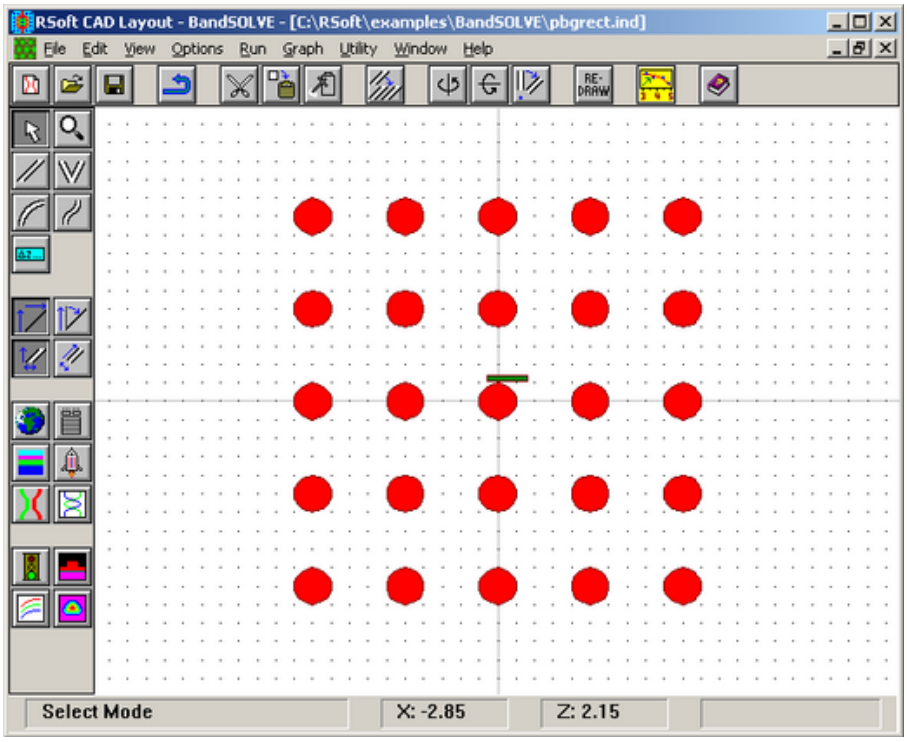
وقتی نصب کامل شد، مراحل زیر را برای چک کردن اینکه، Band SOLVE درست نصب شده است انجام دهید.

از محیط RSoft Photonics CAD شروع کنید.

Windows : منوی شروع Windows را برای باز کردن ابزار RSoft photonics CAD استفاده کنید
Unix: xbcad را کنار اعلان فرمان وارد کنید.

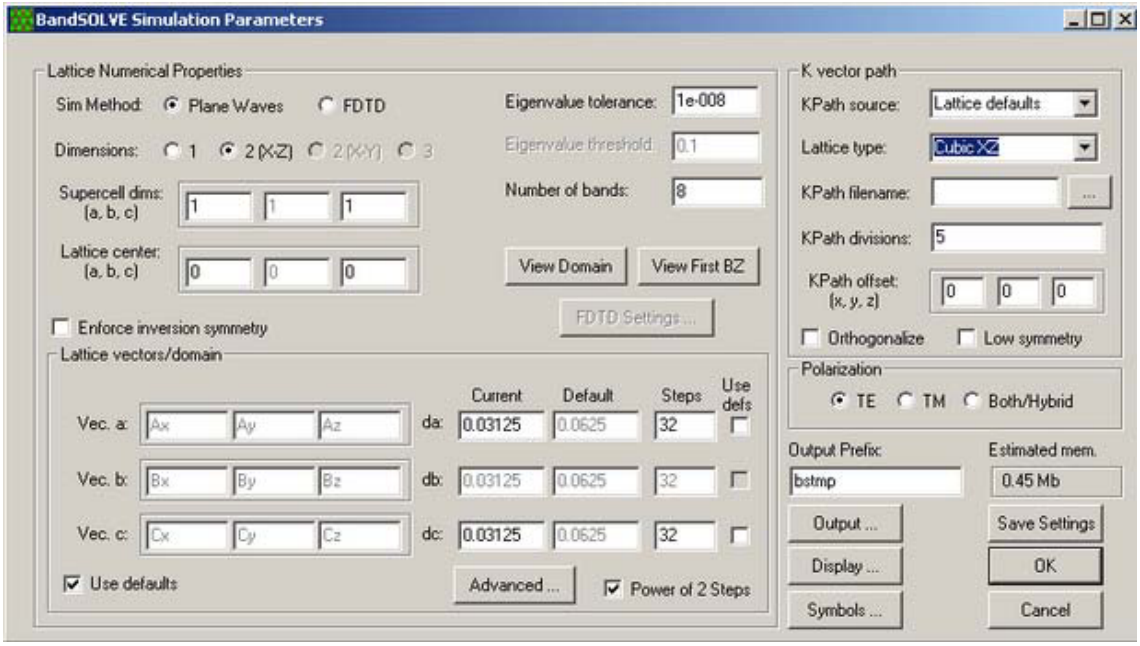
۱- فایل <rsoft_dir>/Examples/BandSOLVE/pbgrect.ind را انتخاب کنید.

۲- پنجره RSoft مثل شکل زیر دیده می شود



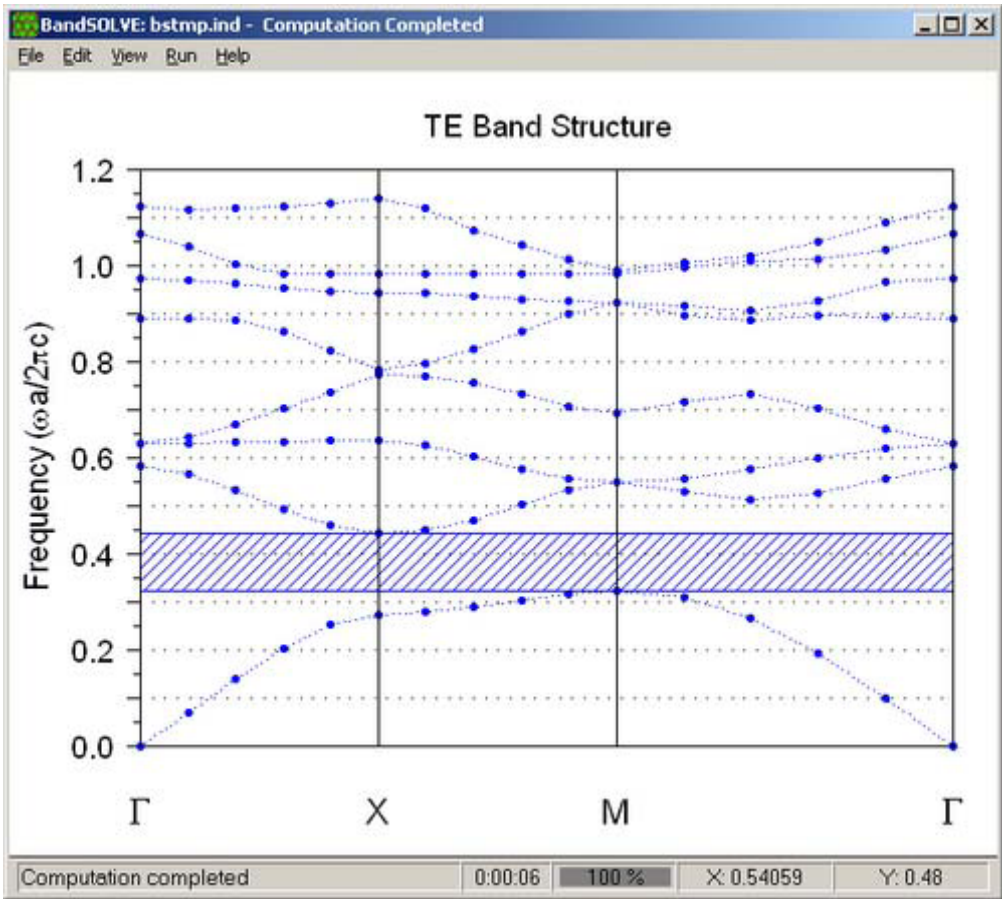
شکل۲-۱ پنجره Band solve

۳- روی Toolbar در قسمت چپ طرح، دکمه ای که نماینده چراغ سبز ترافیک است را انتخاب کنید. پنجره BandSOLVE اصلی نمایان می شود.



شکل۲-۲ پارامترهای شبیه سازی

۲- کلید OK را انتخاب کنید. شبیه سازی BandSOLVE شروع مـی‌شـود و پنجـره BandSOLVE جدید نمایان می‌شود که شامل دیاگرامهای ساختار باند است. در چند لحظه، شبیه سازی کامـل مـی شود و پنجره BandSOLVE باید شبیه شکل زیر باشد:



شکل ۲-۳ دیاگرمهای ساختار باند

بنابراین، نصب با موفقیت انجام شده است، و اگر نه دستورات نصب را مرور کنید. اگر پیغام خطا شبیه **This harldlock key is not licensed for BandSOLVE** بود، لطفاً چک کنید که همه فایل های key و license را جایگزین کرده اید.

۲-۴ آگاه کردن *BandSOLVE* از نصب *MayaVi*

اگر نصب MayaVi را انتخاب نکرده اید، از این قسمت عبور کنید.

برای آگاهی BandSOLVE از مسیر نصب MayaVi، مراحل زیر را انجام دهید.

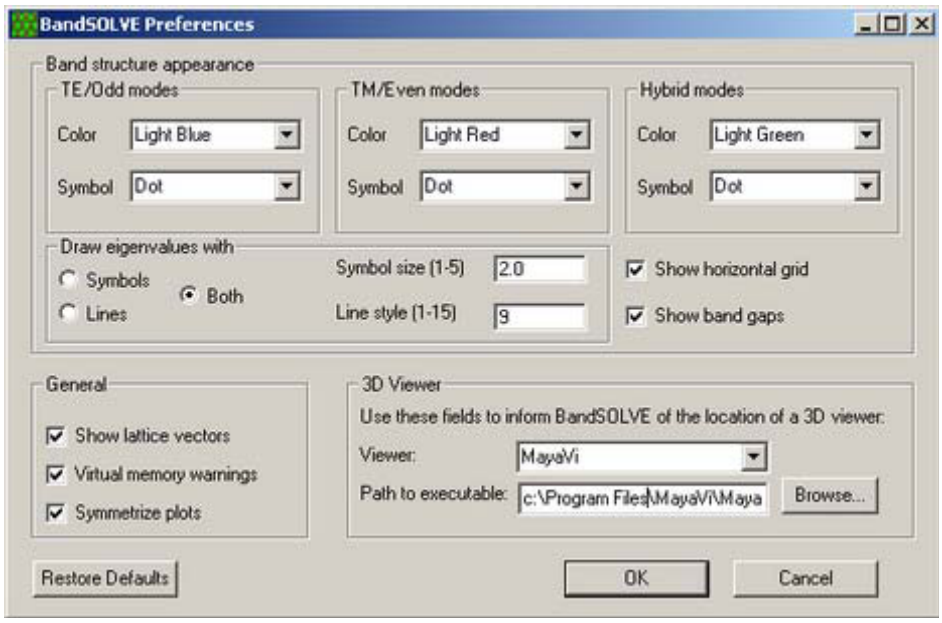
۱- با یافتن آن از منوی شروع مطمئن شوید که MayaVi درست نصب شده است.

۲- RSoft را مثل مرحله اول از بخش قبلی شروع کنید.

۳- فایل Rsoft/Examples/BandSOLVE/diamond.ind را انتخاب کنید یا (linux/unix)usr/local/rsoft/Examples/BandSOLVE/diamond.ind.

۴- در قسمت چپ، کلید سبز را برای باز کردن BandSOLVE فشار دهید، **OK نکنید**.

۵- **Prefs...** را در قسمت پایین سمت راست انتخاب کنید. پنجره جدید BandSOLVE Preferences مثل زیر مشاهده می شود.



شکل۲-۴ اولولیتها(preferences)

۶- در بخش **3D viewer** ، viewer combo_box را از No Viewer به MayaVi تغییر دهید.

۷- در حوزه full path, path to executable را برای MayaVi قابل اجرا تایپ کنید.یا Browse را فشار دهید برای باز شدن پنجره برای انتخاب فایل قابل اجرا.به عنوان مثال، در windows شما می توانید program files/Mayavi/ Mayavi.exe را انتخاب کنید.

۸- برای بستن پنجره ok preferences کنید و به پنجره اصلی BandSOLVE باز گردید. تنظیمات شما اکنون ذخیره شده است.

۹- دکمه **View Domain**، نزدیک مرکز را فشار دهید، درچند لحظه، پنجره MayaVi مشاهده می شود که شامل 3D، یک سیگنال شبکه diamond است.

اگر پنجره MayaVi مشاهده شود، نصب کامل است. اگر پنجره ای مشاهده نشود، مکان MayaVi را چک کنید و مراحل ۴ تا ۹ را تکرار کنید. اگر مشکلی بود، با گروه طراح RSoft تماس بگیرید.

۲-۵ کاری که میتوان بعدا" انجام داد؟

در اینجا شما آماده اید برای استفاده BandSOLVE، اگر تاکنون با نرم افزارهای RSoft کار نکرده اید، باید زمانی را برای یادگیری قابلیت های ساختارهای فوتونی بگذارید.

این فایل خلاصه آخرین اطلاعات مهم درباره BandSOLVE را فراهم می کند که در این راهنما وجود ندارد. به روز کردن در سایت www.rsoftdesign.com هر سه ماه یکبار وجود دارد. برای دریافت به روز شدن، شما باید در سایت ثبت نام کنید.

تذکر: برای اجرای مراحل بالاباید هر دو BandSOLVE و ModViewr باز باشند, فایل مورد نظر در ModeViewr باید load شده باشد. می توان ساختار شبکه های سه بعدی را مشاهده کرد.

فصل ۳ اولین گشت در BandSOLVE

۳-۱مقدمه

در این فصل، ما محدوده کوچکی از امکانات BandSOLVE را به عنوان نمونه نشان می دهیم و تولید دیاگرام های اصلی ساختارهای فوتونی را می بینیم. ما نشان می دهیم که چگونه اطلاعات بدست آمده از محاسبات ساختار باند حل های وابسته به زمان تولید شده از شبیه سازی حوزه زمان از قبیل ابزار FullWAVE گروه طراحی RSoft را تکمیل می‌کند.

۳-۲ انتشار در موجبرکریستالهای فوتونی[1]

در این بخش، ما مثالهای آموزشی استانداردی استفاده خواهیم کرد. از ابزار Rsoft' FullWAVE برای نشان دادن این که چگونه BandSOLVE اطلاعات کاملی از طراحی قطعات کریستال فوتونی را مهیا می کند استفاده می کنیم. اگر شما یک کپی از FullWAVE داشته باشید، می توانید هر دو شبیه سازی در FullWAVE و BandSOLVE را هنگام خواندن انجام دهید. و اگر هم دسترسی ندارید نتایج به اندازه کافی آمده است. فقط اطلاعات مربوط به FullWAVE که با حروف FW آمده نادیده بگیرید و شبیه سازی BandSOLVE را انجام دهید.

۳-۲-۱پشتیبانی مثالها

BandSOLVE با مجموعه بزرگی از مثالها و فایل های خودآموز که ما در همه جا در این راهنما استفاده خواهیم کرد همراه است. پیشنهاد می کنیم که مثالها را در یک جای دیگری برای خودتان کپی کنید.

- **Windows**

در یک مسیر مناسب کپی کنید. C:\RSoft\Examples

- **Unix**

در یک مسیر مناسب از مسیر خانگی کپی کنید. /usr/local/rsoft/examples

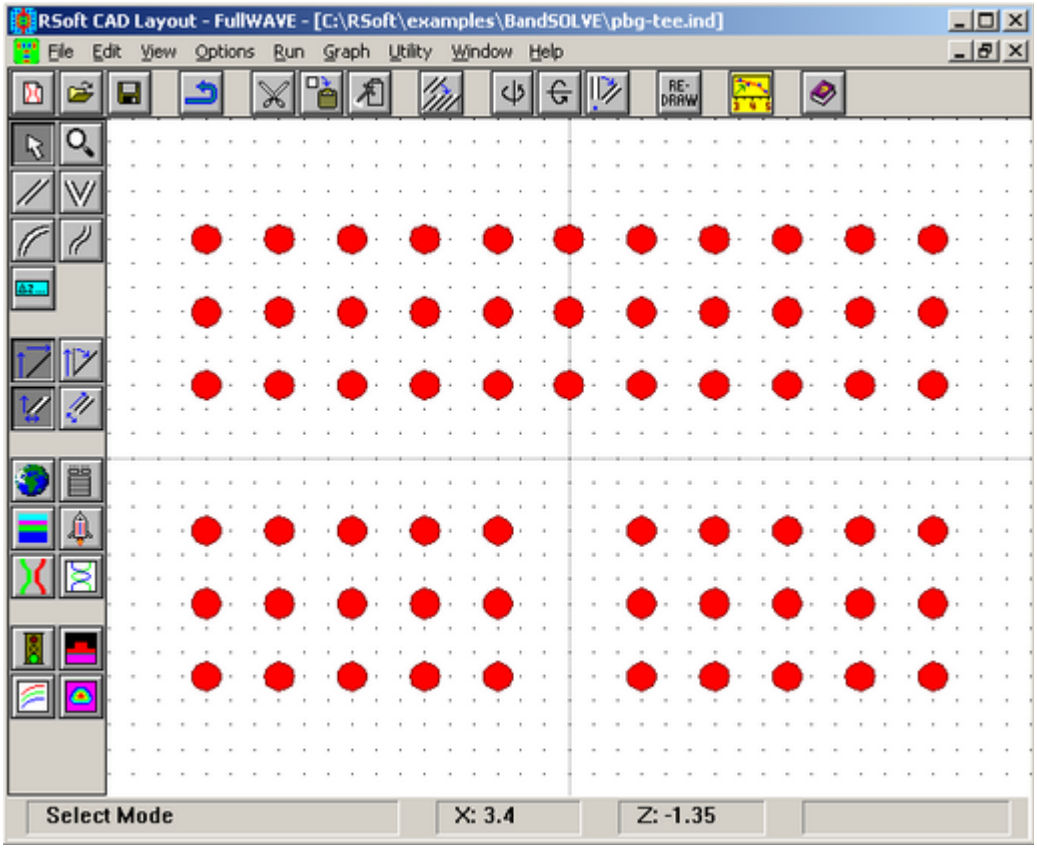
۳-۲-۲ پیوند-T[2] کریستال فوتونی

[1]Propagation in a photonic crystal waveguide
[2] T-junction

ما مثالهای FullWAVE از انتشار در شبکه های کریستال فوتونی دو بعدی را ازمدل پیوند-T امتحان خواهیم کرد.

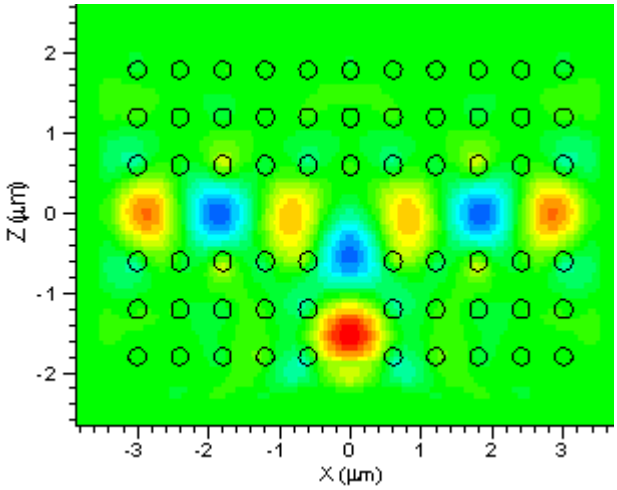
۱- ابزار RSoft CAD را شروع کنید و فایل <rsoft_dir>/Examples/ BandSOLVE/pb-g-tea.ind را باز کنید.

صفحه، کریستال فوتونی مستطیلی2D از میله های دی الکتریک در زمینه هوا را نشان مـی دهـد. دو ردیف برای ساختن هدایت موجبر پیوند T حذف شده است.



شکل ۳-۱ کریستال فوتونی مستطیلی2D

۲- **FW** : شبیه سازی را با فشار دادن کلید سبز اجرا کنید و کلید **ok** را فشار دهید. در پایـان شـبیه سازی، شکل زیر مشاهده می شود.



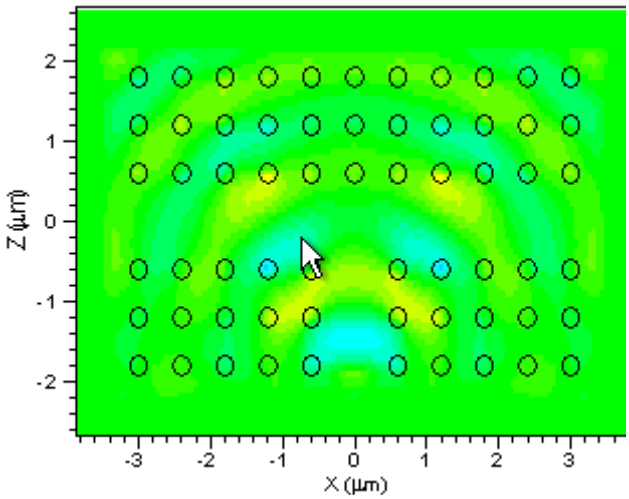
شکل ۳-۲ شبیه سازی

بر اساس بازتاب Bragg به وسیله شبکه کریستالی که نور وارد شونده از کناره های پیوند بدون هیچ تلفی در کریستال با وجود شعاع خمیدگی موجبر مرتبه اول منعکس میشود. این نمایش کلاسیک از قابلیتهای مدارهای کریستال فوتونی است.

شبیه سازی بالا در پلاریزاسیون TE، با رشته های ردیف شده در طول میله دی الکتریک انجام می شود. ولی اکنون ما شبیه‌سازی را با پلاریزاسیون مخالف تکرار می کنیم .

۳- **FW**: به CAD برگردید و پلاریزاسیون را TM تغییر دهید.(پنجره Global setting را باز کنید و TE را به TM تغییر دهید و ok کنید سپس چراغ سبز را فشار دهید و شبیه سازی را تکرار کنید.)

نتایج به طور کلی متفاوت است.



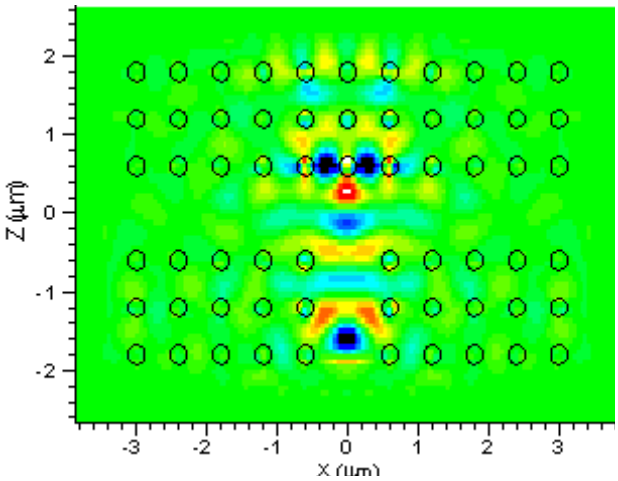
شکل۳-۳ شبیه سازی

در این حالت، میدان در سراسر کریستال پخش می شود که کمترین تأثیر را روی انتشار مجزاا دارد در نتیجه چگالی میدان نزدیک میله ها افزایش می‌یابد.

۴- اکنون ما شبیه‌سازی نهایی را انجام می‌دهیم، به پلاریزاسیون TE بازگردید ولـی مـوجبر نـور وارد شونده را از 1.55 mμ به 1.2mμ کاهش دهید.

FW: به CAD بازگردید و Globalsettings را باز کنید و پلاریزاسیون را به TM تغییر دهید و اکنوان **Free Space Wavelength** را به 1.2 تغییر دهید.(توجه کنید اندازه گیری واحـد در BeamPRob و FullWAVE همیشه میکرون است). شبیه سازی را برای بار آخر اجرا کنید.(**ok** کنید و شبیه سـازی را اجرا کنید.)

با طول موج کاهش یافته شکل زیر را می‌بینید:



شکل۳-۴ شبیه سازی

ساختار نتیجه، پیچیده است. کریستال فوتونی به طور آشکار نقش مهمی در انتشار نور بازی می کنـد ولی نه به صورت مفیدی، از این رو بیشتر نور نسبت به جاری شدن در طول موجبرهای میله- مفقوده به داخل کریستال بازتاب می شود .

۳-۲-۳ توضیح نتایج

به خوانندگان با هر تجربه ای از خواص کریستال فوتونی، این نتایج باید بدون شگفتی باشد. در حالت اصلی نور TE در 1.55mμ، نور وارد شونده در شکاف باند کریستال فوتونی می افتد. از آنجایی که نـور

در کریستال نمی تواند منتشر شود، اگر موجبر در داخل شکاف باند بیافتد، تنها امکان بـرای نـور کـه موجبر را دنبال کند با ردیف های حذف شده ساخته شده است.

در بیشتر قوانین عمومی دستورات پلاریزاسیون برای کریستالهای فوتـونی 2D , TE نـور را بـا میـدان الکتریکی در صفحه کریستال مشخص می کند و برای آرایه مربعی از ردیف ها، آن پلاریزاسـیون TM است که شکاف باند را پشتیبانی می‌کند. انتشار پلاریزاسیون در BandSOLVE با جزئیات در فصل ۷ بحث شده است.

شبیه سازی دوم بدلایل مختلفی مردود است . در مورد موجبر کوتاهتر، نور در بیرون شکاف باند مـی افتد و بازتاب مفیدی به وسیله شبکه وجود ندارد. برای پلاریزاسیون TM آرایه مربعی 2D ردیف ها به طور کلی شکاف باند را پشتیبانی نمی کند و بنابراین شانسی بـرای هـدایت کریسـتال فوتـونی وجـود ندارد.

۳-۳ کاربرد *BandSOLVE*

راه حل این مسأله راهی برای یافتن ساختار باند کریستال فوتونی است. اکنون ما کـاربرد سـاده ای از BandSOLVE را برای یک سلول منفرد کریستال نشان می دهیم.

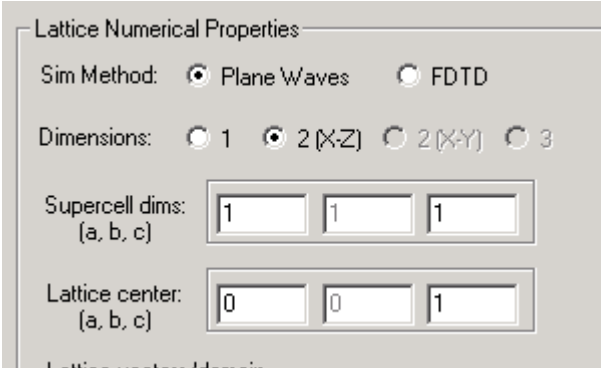
مراحل زیر را انجام دهید:

۱- جدول نمونه ای را باز کنید و می بینید که پریود شبکه به 0.6 تنظـیم شـده اسـت، کـه بـا طـرح کریستال فوتونی سازگار است.

۲- در Tool-bar سمت چپ، Globalsetting را فشار دهید که با علامت کره زمـین مشـخص شـده است. یک پنجره جدیدی باز می شود که شامل همه تنظیمات CAD است. در بالای این پنجره ما می توانیم برنامه شبیه سازی مطلوب را انتخـاب کنـیم. تنظمیـات را از FullWAVE بـه BandSOLVE تغییر دهید سپس **ok** کنید و به CAD برگردید.

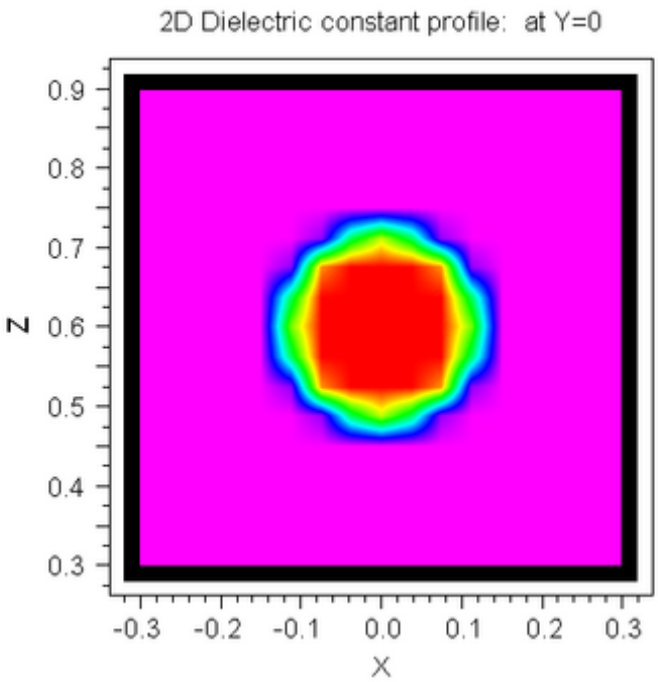
۳- در سمت چپ پنجره به خصوصیات عددی اختصاص دارد. از قبیل بـردار شـبکه کریسـتال تحـت بررسی , شکل و رزولوشن حوزه عددی. میدان Lattice center به ما اجازه می‌دهد تا مختصـات z,y,x مرکز حوزه را تعیین کنیم(در مرکز سمت چپ پنجره) نقطه مرکزی پیش فرض(0,0,0) اسـت. نظربـه طـرح پیونـد- T، در اصـل ردیـف وجـود نـدارد، مـا ردیـف هـا را در یـک سـلول در (x,z)=(0,Period)=(0,0.6) در نظر می گیریم.

در واقع، کنترل مرکز شبکه، تغییر مکان در بردارهای اولیه شبکه را بیان می دارد. بنابراین برای تغییر حوزه یک سلول در مسیر z، سومین میدان مرکز شبکه را از 0 به 1 تغییر دهید. بخش مربوطه پنجره باید اینگونه باشد.



شکل ۳-۵ تنظیمات مرکز شبکه

۵- برای چک کردن حوزه مناسب را تعیین می کنیم، **View Domain** را فشار دهید، پنجره WinPLOT باز می شود که شامل توزیع ضریب شکست[1] است.

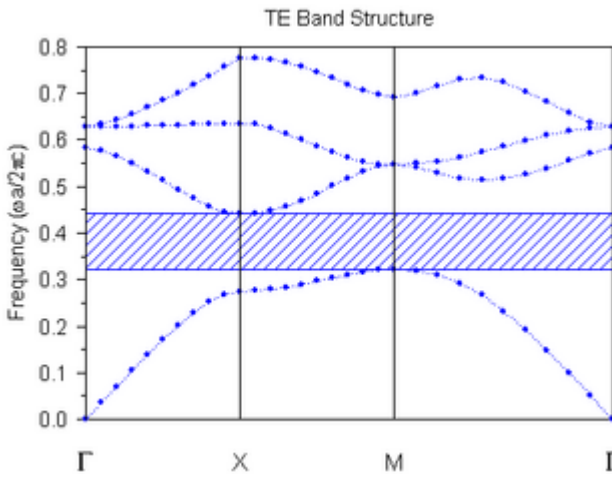


شکل ۳-۶ توزیع ضریب شکست

[1] Refractive index distribution

این براستی ردیف های دایره ای در یک سلول واحد مربعی که Period=0.6 را بیان می دارد.

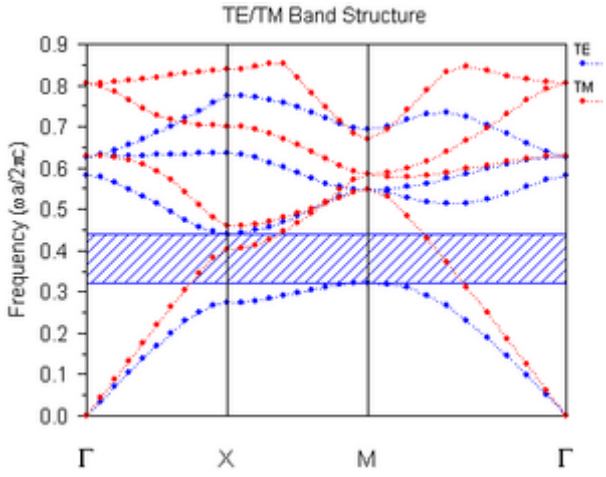
۶- بقیه تنظیمات پیش فرض در BandSOLVE قابل قبول است. بنابراین **ok** کنید تا ساختار باند را تولید کنید. بعد از مدتی، ساختار باند کامل شده، مثل زیر است:



شکل ۳-۷ ساختار باند

ساختار باند شکاف بزرگی بین باندهای اول و دوم را آشکار می کند. تذکر به اینکه، فرکانس $\omega a/2\pi c$ بدون بعد برابر $Period/\lambda$ است که λ، طول موج فضای آزاد است. می بینیم که شکاف در $\lambda = 1.58\mu m$ متمرکز شده است، و طول موج اصلی $1.55\mu m$ برای شبیه سازی FullWAVE پیوند T، بخوبی در شکاف می افتد. در مقابل $\lambda = 1.2\mu m$ با فرکانس بدون بعد 0.5، خارج شکاف، مطابق با شکست موجبر کریستال فوتونی در آن طول موج مطابق است.

۷- اکنون چراغ سبز را فشار دهید. تنظیمات پلاریزاسیون را از TE به Both/Hybrid تغییر دهید و **ok** کنید تا محاسبات تکرار شود. اکنون دیاگرام های مودهای TM و TE در دو رنگ متفاوت مشاهده می شود.



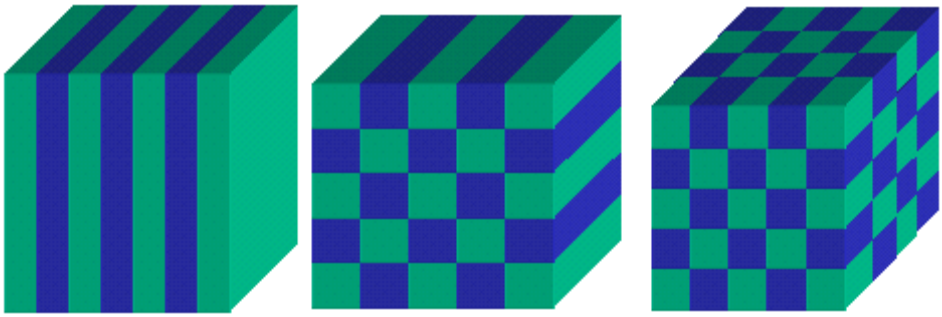
شکل ۳-۸ سختار باند

فوراً مشاهده می شود که پلاریزاسیون TM هیچ شکافی در نزدیکی شکاف TE ندارد و ایـن بـه طـور آشکارا دلیل بر این است که موجبر کریستال فوتونی برای TM مردود است.

فصل ۴ تئوری ساختارهای باند فوتونی

۴-۱ هندسه ساختارهای پریودیک

BandSOLVE برای یافتن مودهای نوری ساختارهای فوتونی با ثابت دی الکتریک های متناوب طراحی شده است. به عنوان مثال در یک، دو، سه بعد، توزیع ضریب شکست[1] $\varepsilon(R)$ به صورت زیر نشان داده می شود:



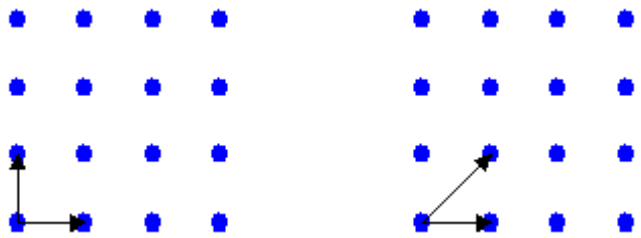
شکل ۴-۱ ساختارهای پریودیک

این خاصیت اساسی سیستمهای متناوب است، فوتونی یا نه، تابع متناوب f(**R**) در شرایط شبکه می تواند تعریف شود.

شبکه مجموعه ای از نقاط مجزا در فضا است که به صورت متناوب تکرار می شود. به صورت ریاضی می گوییم بردارهای ثابت $\mathbf{a}_1$، $\mathbf{a}_2$ و $\mathbf{a}_3$ وجود دارد چنانکه برای همه نقاط **R** در شبکه $R = la_1 + ma_2 + na_3$، برای اعداد صحیح n,m,l.

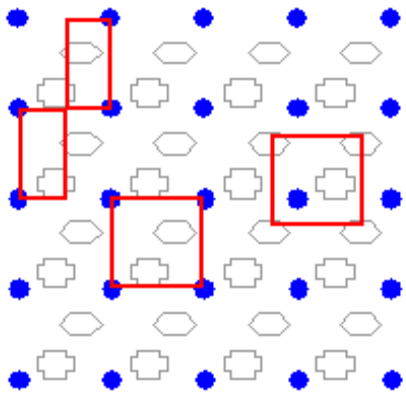
نقاط **R** به بردارهای شبکه معروف است، هنگامیکه بردارهای اصلی $\mathbf{a}_1$،$\mathbf{a}_2$ و $\mathbf{a}_3$ اصطلاحاً بردارهای شبکه اولیه نامیده می شود. توجه داشته باشد بردارهای شبکه منحصر به فرد نیستند. به عنوان مثال، فلش های سیاه دو انتخاب را برای پایه های شبکه مربعی نشان می دهد:

[1] - refractive index distribution



شکل ۴-۲ پایه های شبکه مربعی

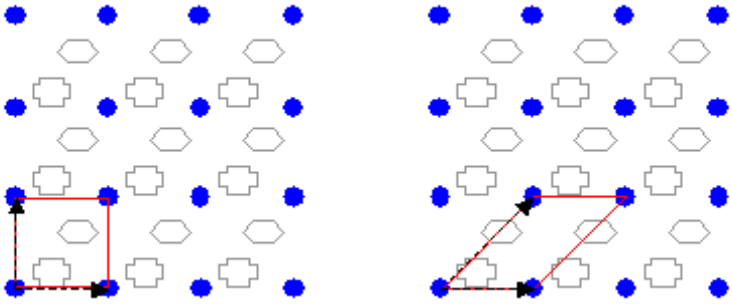
ارتباط بین تابع متناوب پیوسته$f(\mathbf{R})$ و شبکه مجزا با سلول واحد فراهم مـی شـود. سـلول واحـد هـر ناحیه ای از فضا است که، وقتی با هر بردار شبکه ای در شبکه تفسیر مـی شـود کـل تـابع را بکشـد. سلول واحد نیز همانطور که در زیر آمده منحصر به فرد نیست:



شکل ۴-۳ سلولهای واحد اولیه

سه ناحیه که با مرزهای سیاه تعریف شده اند کل توزیع ضریب شکسـت را تولیـد مـی کنـد وقتـی از طریق بردارهای شبکه در شبکه مربعی تبدیل می شود. در هر موردی، سلول واحد دقیقـاً یـک کپـی کامل از شکلهای ضربدری و شش گوشه را شامل می شود. سلول واحد اولیه هر سلول واحـدی اسـت که دارای کمترین حجم ممکن است. بنابراین سه سلول واحد که در بالا نشان داده شده اسـت سـلول های واحد اولیه هستند.

سلول واحد اولیه مناسب می تواند با استفاده از متوازی الاضلاع توسط بردارهای شـبکه اولیـه بدسـت آید همانطور که در دو مثال زیر نشان داده شده است:



شکل ۴-۴ سلول واحد اولیه

۴-۱-۱ شبکه وارون[1]

وابسته به هر شبکه، شبکه دومی است که شبکه وارون نامیده می شود. بردارهای شبکه وارون با معادلات زیر تعریف می شود:

$$r_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \ a_2 \times a_3}$$

$$r_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \ a_2 \times a_3}$$

$$r_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \ a_2 \times a_3}$$

شبکه و شبکه وارون با معادله زیر به هم مربوط می شوند:

$$a_i . r_j = 2\pi\delta_{ij} \quad ,$$

که $\delta_{ij} = 1$، اگر i=j و0 در غیر اینصورت. شبکه و شبکه وارون، اصولاً عکس هم هستند. هنگامی که بردارهای شبکه دارای ابعاد طولی هستند، بردارهای شبکه وارون دارای ابعاد طولی معکوس و محدوده فضایی وارون[2] است. در متن ، بردارهای شبکه وارون پایه های طبیعی برای بردارهای موج نوری را فراهم می کند و نقش اصلی را در تئوری دارد.

۶-۱-۲ اولین ناحیه بریلیون[3]

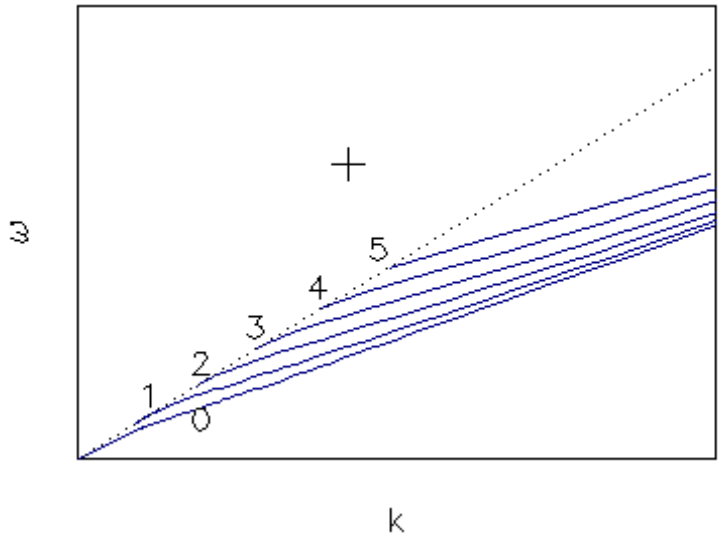
هنگامی که ما مودهای ساختارهی فوتونی متعارف را از قبیل فیبرهای نوری یا موجبرهای دیگر بررسی می کنیم، یکی از هدف های مرکزی تعیین کردن رابطه پراش k=k(ω) و اتصال دهنده به بردار موج[4] یا ثابت انتشار k[1] از مود داده شده با فرکانس ω می باشد، ثابت انتشار مسیر تعیین می کند سرعت فاز مود را مطابق زیر

---

[1] Reciprocal lattice
[2] Reciprocal space
[3] The first Brillouin zone
[4] wavevector

$$E(x,t) = E(x,y)\exp[-i\omega(t - z/v_p)],$$

که مود انتشار را در طول محور z، انتخاب کرده ایم و سرعت فاز[2] $v_p = \omega / k$ است. اگر رابطه پراش را معکوس کنیم برای یافتن ω=ω(k)، سپس یک راه حل متفاوت برای هر مقدار از بردار موج k بدست می آوریم. برای k به اندازه کافی بزرگ ، سیستم مودهای چندگانه را پشتیبانی می کندو حل های متعدد ω_i برای هر مقدار k وجود دارد.این رفتار در شکل ۵ نشان داده شده است.



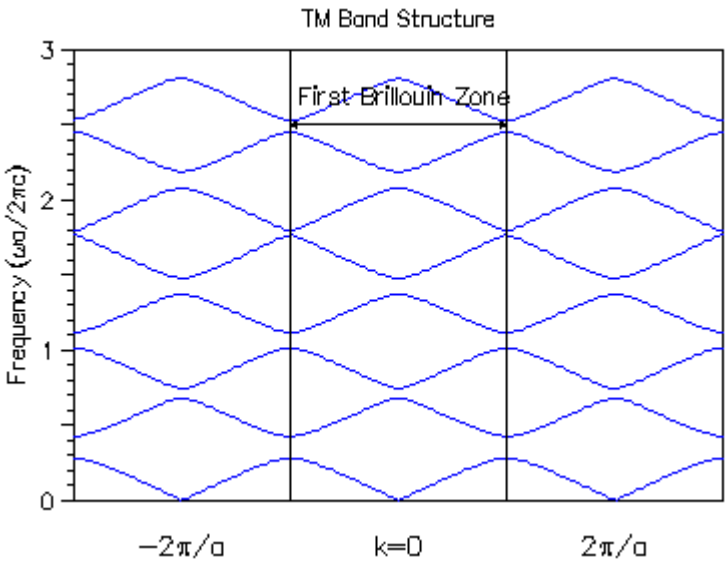
شکل ۴-۵ منحنی های پراش برای مودهای TM از موجبرهای صفحهای

در سیستم های متناوب مثل کریستالهای فوتونی منحنی پراش به صورت محسوس متفاوت است. هدف ما هنوز یافتن فرکانس ها ωi(k) از همه مودها برای یک بردار موج k داده شده است.

ولی حل های متمایز برای هر مقدار k پیدا می شود. در شکل ۶، یک بخشی از ساختار باند(رابطه پراش) برای مودهای TM از یک شبکه مربعی یک بعدی با دوره تناوب a را نشان داده ایم. چنانچه بردار موجk تغییر کند، فرکانس های مود با پریود $2\pi / a$ تکرار می شود.

---

[1] Propagation constant
[2] Phase velocity



شکل ۴-۶ منحنی پراش برای مودهای شبکه 1D

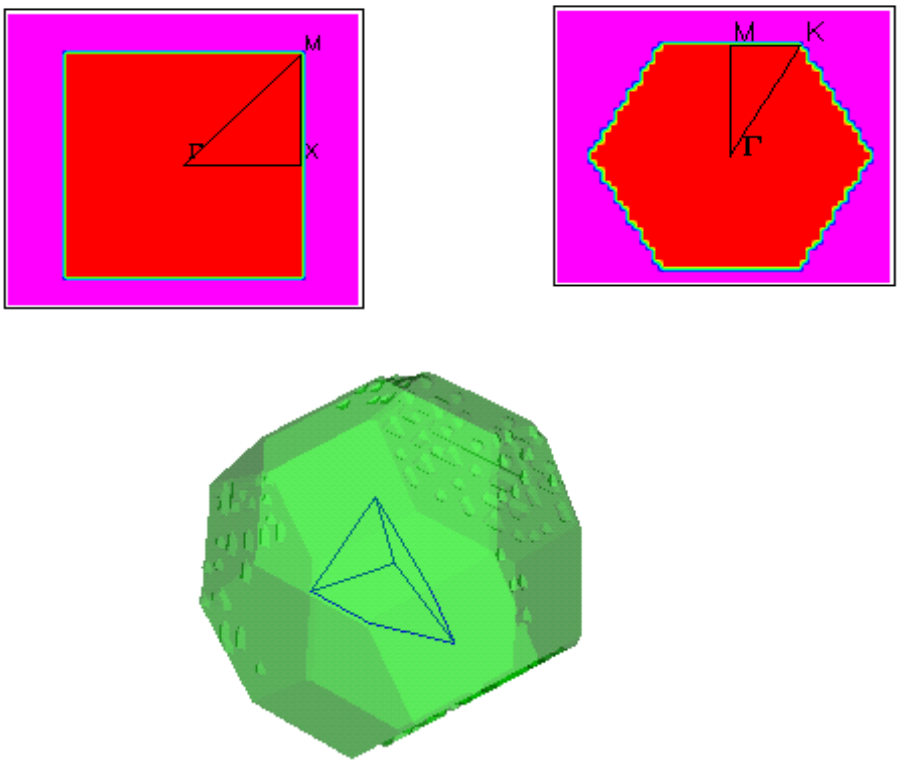
به طور دقیق، برای هر بردار موج **k** و هر بردار شبکه هم پاسخ **G**، ما می توانیم یک مود j بـرای هـر مود i پیدا کنیم بطوریکه:

$$\omega_i(\mathbf{k}) = \omega_j(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

این نتیجه کار ما را فوق العاده زیاد راحت تر می کند، از این رو برای یافتن همه مودهای کریستال، ما باید مساله را در مجاورت ناحیه معکوس اصلی حل کنیم و برای طرح کردن این مجـاورت دقیـق، مـا اولین ناحیه بریلیون را تعریف می کنیم(1BZ):

- اولین ناحیه بریلیون فضای هم پاسخ شامل همه نقاط نزدیک تر به مبدأ نسبت بـه هـر بـردار شبکه هم پاسخ دیگر است.

شکل ۷ 1BZ را برای نمونه های کریستال معمولی نشان می دهد. نقاط با حروف در این دیـاگرام هـا مطابق با نقاط متقارن در 1BZ برچسب دار شده است.



شکل ۴-۷ اولین ناحیه بریلیون

۴-۲ تئوری ساختارهای باند

اکنون به محاسبات ساختار باند می پردازیم.

برای دلایل تکنیکی، ما مساله را در شرایط میدان مغناطیسی $\mathbf{H}(x,t)$ بیان می کنیم. BandSOLVE برای حل های مستقل از زمان حل می کند بنابراین میدان مغناطیسی را مانند زیر بیان می کنیم.

$$\mathbf{H}(x,t)=\mathbf{H}(t)\exp(-i\omega t)$$

ابتدا نشان می دهیم که میدان مغناطیسی در سیستم های متناوب فرم ویژه ای دارد.

۴-۲-۱ قضیه بلاخ[1]

مودهای کریستالهای فوتونی باید البته حل های معادلات ماکسول[2] باشد. هر چند ملاحظات تقارن برای شیوه راه حل، محدودیت قائل می کند. بخصوص مودها باید تقارن انتقال مناسب را ارضا کنند.

[1] Bloch's theorem
[2] Maxwell's equation

از آنجایی که توزیع ضریب شکست در هر سلول واحدی یکسان است، مود باید بدون تغییر باقی بماند،اگر در فضا با هر بردار شبکه ای **R** تغییر مکانی دهد. راه حل می تواند با ثابت فاکتور فاز تغییر کند.

ما انتقال را در جمله عملگر $\hat{T}_R = \exp(iR\ \nabla)$ بیان می کنیم و راه حل ها را جستجو می کنیم که مقادیر ویژه $\hat{T}_R$ می باشد. راه حل هایی که فقط با تغییر فاز تحت عملگر $\hat{T}_R$ تفاوت دارند. فرم زیر را ملاحظه کنید.

$$H(x) = \exp(ikx)\sum_j c_j \hat{\varepsilon}_j \exp(i\,G\,x) \qquad (۱)$$

ما یک موج صفحه ای اختیاری را نشان می دهیم که توسط سری فوریه در بردارهای شبکه هم پاسخ ضرب شده است. C_j ها ضرایب بسط هستند و $\hat{\varepsilon}_j$ بردارهای پلاریزاسیون انتخاب شده برای ضمانت اینکه میدان متقاطع است. باید کار بدون عملگر انتقال برای **H**(x)، نشان می دهیم:

$$\begin{aligned}\hat{T}_R H(x) &= \sum_j C_j \hat{\varepsilon}_j \exp[i(k+G_j)\ R]\exp[i(k+G_j)\ x] \\ &= \sum_j C_j \hat{\varepsilon}_j \exp[ik\ R]\exp[i(k+G_j)\ x] \\ &= \exp[ik\ R]\exp[ik\ x]\sum_j C_j \hat{\varepsilon}_j \exp[iG_j\ x] \\ &= \exp[ik\ R]H(x)\end{aligned}$$

بنابراین، این فرم برای میدان مغناطیسی فقط توسط فاکتور فاز تحت انتقال با بردار شبکه تغییر می کند. در واقع، این می تواند نشان دهد که این شکل عمومی راه حل ممکن است، که نتیجه به تئوری بلاخ معروف می باشد. میدان مغناطیسی باید شکل موج صفحه ای که در تابع با تناوب شبکه ضرب شده را بپذیرد:

$$\mathbf{H}(x)=\exp(i\mathbf{k}\cdot x)\mathbf{u}_k(x) \qquad (۲)$$

که $\mathbf{u}_k(x)=\mathbf{u}_k(x+\mathbf{R})$ برای همه بردارهای شبکه **R**.

توجه کنید که تئوری بلاخ ادعای اولیه ما را در رسم ساختار باند تصدیق می کند. ما فقط نیاز داریم که بردار موج k را در کنار 1BZ ملاحظه کنیم. برای ملاحظه بردار موج k' خارج 1BZ یک بردار شبکه هم پاسخ G وجود دارد چنانکه $k' = k + G$ و k در داخل 1BZ است. بنابراین:

$$\begin{aligned}H(x) &= \exp(ik'\ x)u_{k'}(x) \\ &= \exp(ik\ x)\exp(iG\ x)u_{k'}(x) \\ &= \exp(ik\ x)[\exp(iG\ x)u_{k'}(x)] \\ &= \exp(ik\ x)u'_k(x),\end{aligned}$$

که $\exp(iG\ x)$ یک تابع با تناوب شبکه است. بنابراین هر راه حل برای یک بردار موج خارج 1BZ به طور ساده با یک راه حل در باند متفاوتی در داخل 1BZ مطابق است .

۴-۲-۲ فرمول بندی مقادیر ویژه معادلات ماکسول

اکنون ما معادلات حاکم حل شده با BandSOLVE را که بر اساس معادله هلم هولتز برداری[1] است را بدست می آوریم.

شروع از معادلات کرل ماکسول[2] در واحدهای SI می باشد:

$$\nabla \times E(x,t) = -\frac{\partial B}{\partial t}$$
$$\nabla \times H(x,t) = \frac{\partial D}{\partial t} \qquad (۳)$$

ما فرض می کنیم که همه مواد خطی، بدون تلف و ایزوتوپ هستند، بنابراین:

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon(x) E,\ B = \mu_0 H \qquad (۴)$$

که تابع دی الکتریک $\varepsilon(x)$ مجذور ضریب شکست است.

تعبیر راه حل های مستقل زمانی

$\mathbf{E}(x)=\mathbf{E}(x)\exp(-i\omega t)$،

$\mathbf{H}(x)=\mathbf{H}(x)\exp(-i\omega t)$،

ما می توانیم معادلات ماکسول را برای بدست آوردن معادلات هلم هولتز ترکیب کنیم:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(x)} \nabla \times \right] H(x) = \frac{\omega^2}{c^2} H(x) \qquad (۵)$$

در ادبیات کریستال های فوتونی، این معادله گاهی معادله اصلی عنوان می شود. اگرچه این جمله را نباید به کار ببریم.

با استفاده از تئوری بلاخ، ما می نویسیم $\mathbf{H}(x)=\exp(i\mathbf{k}\bullet.x)\mathbf{u}_k(x)$ ، که $\mathbf{u}_k(x)$ یک تابع با دوره تناوب شبکه است.

با جایگذاری این فرمول در معادله هلم هولتز بدست می آوریم:

---

[1] Vector Helmhotz equation
[2] Maxwell curl equation

$$\hat{L}u_k = (ik+\nabla)\times\left[\frac{1}{\varepsilon(x)}(ik+\nabla)\right]\times u_k = \bar{\omega}^2 u_k, \qquad (۶)$$

که ما عملگر $\hat{L}$ و فرکانس نرمالیزه شده را $\bar{\omega} = \omega / c$ تعریف می کنیم. این معادله اصلی می باشد که با BandSOLVE حل شده است. آن به عنوان معادله مقدار ویژه برای مقدار ویژه نامعلوم $\bar{\omega}$ و بـردار ویژه $\mathbf{u}_k$ با بردار موج **k** به عنوان پارامتر آزاد است. این آخرین بحث ما در روابط پراش بردار موج را به عنوان مقدار مستقل تصدیق می کند.

روش های حل معادله (۶) در زیر بحث می شود.

۴-۲-۳ ساختارهای باند، شکاف های باند[1] و معانی آنها

برای هر مقدار k، معادله(۶) دارای تعداد نامحدودی راه حل $\bar{\omega}_{k,n}$ است که با شماره باند[2] n با مقیاس افزایش فرکانس بر چسب دار شده است. در BandSOLVE، قراردادی که پایین تـرین بانـد بـا n=0 برچسب دار شده است را استفاده می کنیم. چنانچه k را بیشتر از مقادیر ممکن تغییر دهیم، مجموعه راه حل های $\bar{\omega}_{k,m}$ برای عدد ثابت m یک باند را تشکیل می دهد؛ و ساختار باند کریسـتال مجموعـه ای از این باندها است.(شکل ۲ را ببینید) قبلاً نشان دادیم که فقط نیاز بـه ملاحظـه مقـدار **k** داخـل اولین ناحیه بریلیون در شبکه هم پاسخ داریم.

بنابراین توصیف کامل از ساختار باند شامل یافتن همه راه حل های $\bar{\omega}_{k,n}$ برای همه مقادیر k در 1BZ است.(برای توصیف عددی، البته k در رزولوشـن مناسـب را مجـزا مـی کنـیم و مسـائل را در مقـادیر گسسته حل می کنیم.)

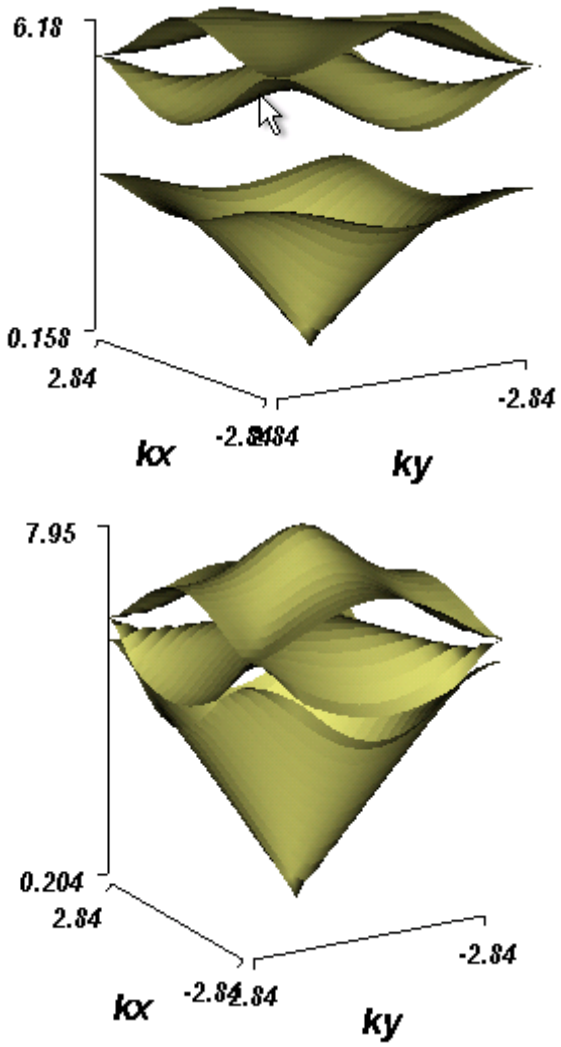
برای هر توزیع ضریب شکست قابل قبول، فرکانس ها در باند ویژه $\bar{\omega}_{k,m}$ به طـور یکنواخـت در بـردار موج تغییر می کند، شکل گیری منحنی در فضای **k** در مسائل 1D، صفحه در مسائل 2D و یا فضا در مسائل 3D صورت می گیرد. شکل ۴ صفحات را برای شبکه مکعبی 2D از میله ها در هوا نشـان مـی دهد. صفحه افقی فضای شبکه هم پاسخ 2D است و محور عمودی مود فرکانس را نشان می دهد. هـر صفحه یک باند منفرد را نشان می دهد.

مفهوم شکاف باند با نظربه رابطه باندهای مجاور ناشی می شود، مثلاً m و m+1. در بیشتر موارد یـک نقطه یا بیشتر در فضای k وجود دارد که باندهای مجاور با هم تماس دارند. به عنوان مثال، در قسمت چپ صفحه در شکل ۴. که باندها را برای پلاریزاسیون TM نشان می دهـد و صـفحه دوم و سـوم بـا گوشه های حوزه تماس دارد، هنگامی که صفحات دوم و سوم در نقاط در طول گوشه ها تماس دارند در واقع، پایین ترین نقاط در صفحه دوم زیر بالاترین صفحه اولی قرار می گیرد.

---

[1] Band gaps
[2] Band number

اگرچه، اگر توزیع ضریب شکست به درستی انتخاب شود، آنجا می تواند باندهای مجاوری وجود داشته باشد که در هیچ نقطه ای تماس ندارد. در این مورد، محدوده ای از فرکانس ها بین دو باند وجود دارد که در کل، راه حل هایی وجود ندارد. این چنین محدوده شامل شکاف بانـد اسـت، و آن بـرای تـابش فرکانس در شـکاف بـرای انتشـار در کریسـتال ممکـن اسـت. قسـمت بـالایی در شـکل ۴،کـه بـرای پلاریزاسیون TE، محاسبه شده است شکاف باند بزرگی بین اولین و دومین باند را نشان می دهد.



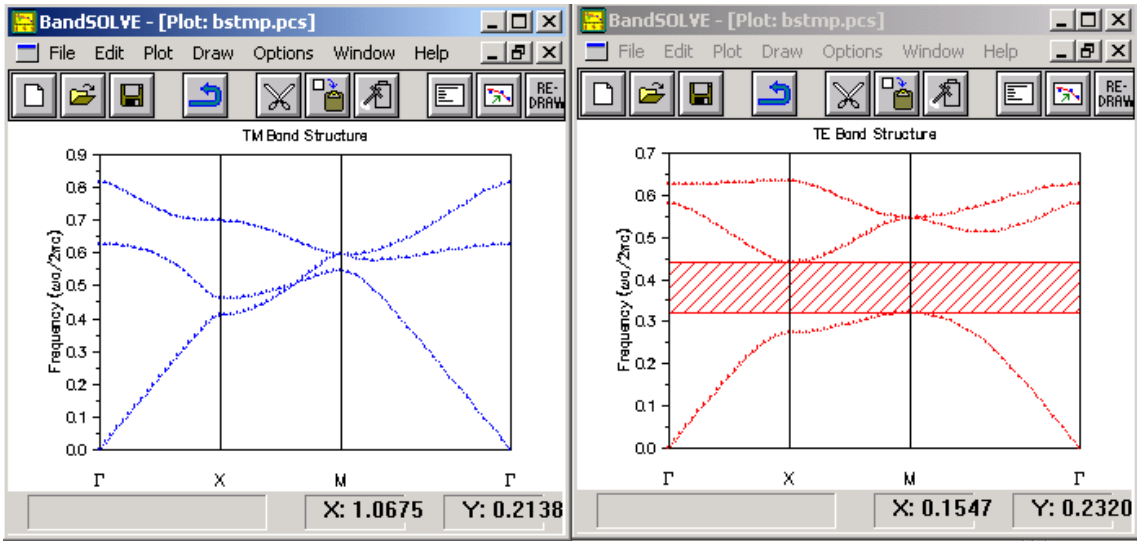
شکل ۴-۸ صفحات فرکانسی شبکه مکعبی 2D (بالا TEوپایین TM)

تذکر: BandSOLVE به صورت اتوماتیک نمیتواند نمودارهای شکل ۸ را تولید کند، اگرچـه ایـن در محصولات بعدی امکان پذیر خواهدشد.

۴-۲-۴دیاگرام های باند

خوشبختانه، برای بیشتر کاربردهای جای دادن و بهینه کردن شکاف های باند، و محاسبات پراش مودهای معیوب، فقط آزمودن زیرمجموعه کوچکی از نقاط داخل 1BZ، ضروری است. تئوری گروه می تواند برای نشان دادن نقاط حدی همه باندها استفاده شود که باید در نقاط متقارن رخ دهد. بنابراین اگر شکاف باند در نقاط متقارن یافت شود، ما می توانیم مطمئن شویم که شکاف در نقاط داخل 1BZ می ماند. هر ساختار کریستالی با مجموعه ای از نقاط متقارن مشخص می شود که با حروف استاندارد مشخص شده است. برای کشیدن ساختار باند، نقاط مرزی را از 1BZ مشخص می کنیم و آنها را با خط راست به هم متصل می کنیم. شکلهای BZ در شکل ۷ این نقاط و خطها را نشان می دهد. ساختار باند در طول این خطها محاسبه می شود و به صورت یک نمودار نشان داده می شود. شکل ۹ دیاگرام های باند برطبق مثالهای شکل ۸ را نشان می دهد. چنانچه انتظار داریم از نقشه های سطحی کامل، باندها در دیاگرام های TM همگی به هم متصلند، در حالیکه شکافی در موردTE وجود دارد.(توجه کنید که مقیاس عمودی در شکل ۸ بسیار اغراق آمیز است.)

BandSOLVE محلها و نمادها را برای نقاط مرزی از یک رنج وسیعی از نمونه های کریستال می شناسد و به صورت اتوماتیک مسیرهای بردار k مناسب را برای هر نوع کریستال قرار می دهد.



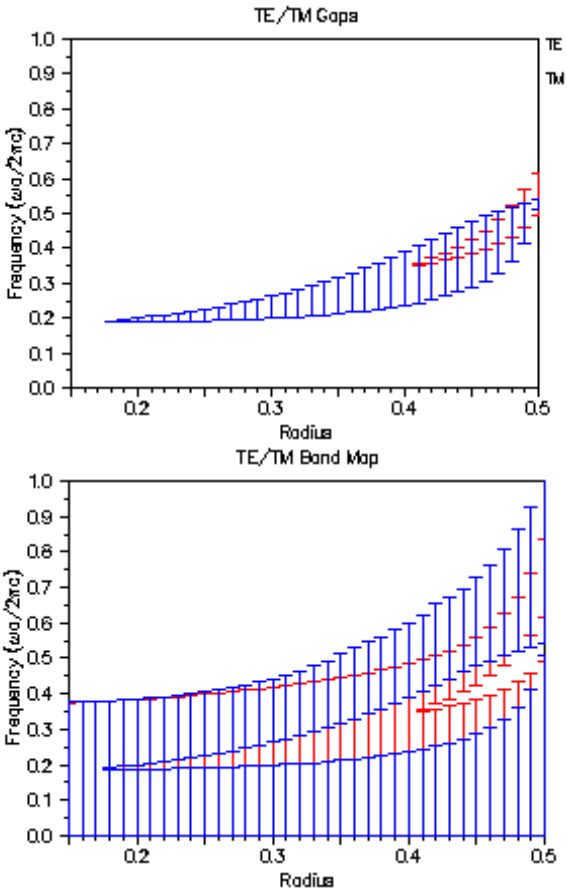
شکل ۴-۹ دیگرام های باند TM وTE برای شبکه مکعبی از میله ها در هوا

۴-۲-۵ ساختارهای باند کاهش یافته و کشیده شده

در بهینه سازی طرحهای کریستالهای فوتونی، اغلب مشخص کردن ساختار باند به عنوان تابعی از یک یا چند پارامتر طراحی مهم است. اگر هدف اصلی در بهینه سازی شکاف ها بود، پس دیاگرام های باند

مثل آنچه در شکل ۹ است اطلاعات بیشتری نسبت به آنچه مورد نیاز است را دارا خواهد بود. ما نیاز نداریم بدانیم که نقاط مرزی ویژه در لبه های چه باندی اتفاق می افتد، ما فقط می خواهیم بدانیم که شکاف در طول 1BZ یا در عرض آن به وجود آمده است یا نه. با فشرده سازی شکل به صورت افقی به یک نقطه واحد، ما می توانیم ساختار باند را به عنوان یک سری از خطوط عمودی- ساختار باند کاهش یافته- نشان دهیم.

شکاف ها به صورت فضایی بین خطوط پدیدار می شود. ما می توانیم پارامتر طراحی را تغییر دهیم، و چگونگی تغییرات توزیع شکاف ها و باندها را مشاهده کنیم. شکل ۱۰ این ایده را روشن تر می کند. ساختار باند کاهش یافته برای شبکه مکعبی 2D به صورت تابعی از شعاع میله ها نشان داده شده است. شکل ۶ نقشه شکاف را برای همان مسأله نشان می دهد که فقط ساختار باند کاهش یافته معکوس شده است. شکل شکاف نشان می دهد که شکاف TE(آبی) در رنج عریض تری نسبت به شکاف TM به وجود می آید. همچنین مشاهده شعاع بهینه برای شکاف مشترک آسان است.



شکل۴-۱۰ بالا- شکل شکاف مساله شبکه مکعبی 2D پایین- ساختار باند کاهش یافته

۴-۳ قوانین مقیاس گذاری

ما به طور خلاصه دو خاصیت مقیاس گذاری معادله هلم هولتز برداری را کـه در اجتنـاب از کارهـای غیرضروری مفید است، بیان می کنیم.

معادله هلم هولتز(۵) را بیاورید:

$$\nabla \times \left[\frac{1}{\varepsilon(x)} \nabla \times \right] \mathbf{H}(x) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(x)$$

فرض کنید ما توزیـع ضـریب شکسـت را یـا مقیـاس $\varepsilon_2(x) = \varepsilon(x/\sigma)$ جایگـذاری کنـیم. بنـابراین $\varepsilon_2(x)$ دارای همان شکل است ولی با فاکتور σ، بسط داده شده است. پس توسط رسم کردن موقعیت متغیرها برای بدسـت آوردن معادلـه هلـم هـولتز اصـلی بـا کشـیدن فرکـانس بـه مقیـاس کـوچکتر $\omega_2 = \omega / \sigma$.

BandSOLVE مقادیر ویژه فرکانس نرمالیزه شده را با مقیاس طولی مناسب از قبیل طول سلول واحد معمولی نشان می دهد. بنابراین دلیلی برای تغییر متغیر دوره تناوب که اندازه شبکه را کنترل می کند وجود ندارد و به صورت مشابه تبدیلی که دامنه توزیع شکست را به شکل $\varepsilon_3(x) = \sigma\varepsilon(x)$ تغییر مـی دهد می تواند خارج از معادله هلم هولتز با مقیاس گذاری مجدد فرکانس به عنوان $\omega_3 = \sigma\omega$ مقیاس گذاری شود.

۴-۴ پلاریزاسیون

به طور کلی مودهای کریستالهای فوتونی 3D هیبرید هستند و شامل شش مولفه می باشند (Hy, Hx; Ez, Ey, Ex, Hz) . اگرچه برای مسائل 1D و 2D بردار معادله بـرای معـادلات مـدهای پلاریزاسـیون مجزا قابل تفکیک است . فرض کنید برای مثال، ثابت دی الکتریک از محور y مستقل است. پـس، راه حل ها فرم های مودهای TE با (Hx, Hz,Ey) غیرصفر یا مودهای TM با (Hy, Ex, Ez) را میگیرد.

راه حل های TM و TE معادلات موج ساده را ارضا می کند. مودهای TE راه حل هایی از معادله موج عددی است:

$$\left[\nabla_t^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon \right] E_y = 0$$

هنگامی که مودهای TM معادله موج را ارضا می کند:

$$\nabla_t \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla_t H_y \right) + \frac{\omega^2}{c^2} H_y = 0$$

۴-۵ زوجیت[1]

جدایی معادلات ماکسول به پلاریزاسیون TM و TE فقط برای مسائل 2D و 1D امکان پذیر است. اگر ثابت دی الکتریک به هر سه مختصه وابسته باشد، جواب معادلات موج، مودهای هیبرید است. از آنجایی که ساختار تحت بازتابها در صفحه ثابت است، مودهای مسأله باید بردارهای ویژه از عملگر انعکاس $\hat{M}_y$ باشد، که بردار موج k را که تحت بازتاب ثابت است فراهم می کند. بردار موج k باید در صفحه بازتاب باقی بماند. چنانچه عملگر بازتاب $\hat{M}_y\hat{M}_y = 1$، ارضا کند مقادیر ویژه باید مقدارهای $P_y = \pm 1$ را بگیرد. مودها دارای پریتی زوج یا فرد هستند. اجزا منفرد میدانها نیز دارای پریتی زوج و فرد نسبت به صفحه بازتاب هستند، به هر حال همه آنها دارای پریتی یکسان نیستند. این از اینکه میدان الکتریکی یک بردار قطبی و میدان مغناطیسی یک بردار محوری است نتیجه می شود ، آنها تحت عملیات انعکاس تغییر می کنند.

به عنوان مثال تحت عملیات $\hat{M}_y$ تبدیل میدانها در ذیل آمده است:

$$\hat{M}_y[E_x(x,y,,z),E_y(x,y,z),E_z(x,y,z)] = [E_x(x,-y,z),-E_y(x,-y,z),E_z(x,-y,z)]$$

$$\hat{M}_y[H_x(x,y,,z),H_y(x,y,z),H_z(x,y,z)] = [-H_x(x,-y,z),H_y(x,-y,z),-H_z(x,-y,z)]$$

جدول زیر خلاصه می کند روابط پریتی میدانها:

جدول ۴-۱ روابط پریتی

عملگر	پریتی مود	En	Ey	Ez	Hx	Hy	Hz
$\hat{M}_x$	+1	-1	1	1	1	-1	-1
$\hat{M}_x$	-1	1	-1	-1	-1	1	1
$\hat{M}_y$	+1	1	-1	1	-1	1	-1
$\hat{M}_y$	-1	-1	1	-1	1	-1	1
$\hat{M}_z$	+1	-1	1	-1	1	-1	1
$\hat{M}_z$	-1	-1	-1	1	1	1	-1

[1] Parity

مودهای ساختار که دارای بازتاب محورها در طول دو یا سه جهت مختلف ممکن است پریتی ها در طول دو یا سه جهت انتقال می دهد. در آن مود، پریتی مود محصول پریتی ها در طول هر جهت است.

اکنون ملاحظه کنید که یک ساختار 2D می تواند به عنوان ساختار 3D در نظر گرفته شود که در طول مثلاً y یکنواخت باشد. آن نیازمند این است که میدانها تحت هر کدام از این تبدیلها ثابت باشد، که وجود مودهایTE و TM در 1D و 2D را ناشی می شود. بدین گونه مودهای زوج و فرد 3D در طول مودهای TM و TE به ترتیب است.

۶-۴ روش های عددی

اکنون به طور خلاصه طرح کلی شکل عددی استفاده شده در BandSOLVE را برای محاسبات مودهای سیستم های متناوب بیان می کنیم. توجه کنید که هنگامی که BandSOLVE برای استفاده ابزار شبیه سازی FDTD، شکل داده می شود شرح زیر به کار نمی رود.

به یاد بیاورید که حل مسائل مقدار ویژه در معادله (۶.۶) برای فرکانس $\bar{\omega}$ و تابع مود $\mathbf{u}_k$، برای هر مقدار مورد نیاز از بردار موج $\mathbf{k}$ است. روش ها استفاده از تغییر بیان معادلات ماکسول را طرح می کند. هنگامی که عملگر $\hat{\mathbf{L}}$ هرمیشن[1] است پس تابع

$$E[u_k(x)] = \frac{\int dx^3 u^*_k [\hat{L} u_k]}{\int dx^3 u_k^* u_k}$$

تضمین می کند که با هر انتخابی از تابع میدان مغناطیسی $\mathbf{u}_k$ حقیقی و مثبت است. علاوه بر این، می توان نشان داده شود که تابعی که $E[\mathbf{u}_k]$ را کمینه می کند بردار ویژه از $\hat{\mathbf{L}}$ از فرکانس مینیمم $\bar{\omega}$ است پایین ترین مود تابعی است که $E[\mathbf{u}_k]$ را کمینه می کند و به طور همزمان بر پایین ترین مود عمود است.

بنابراین می توانیم مودهای زیادی را بیابیم(باندها) که توسط کمینه سازی موفق E[uk]، و به طور عمود بر هر مود در مقابل همه مودهای یافته شده قبلی نیاز است.

برای پیاده سازی کمینه سازی، تابع مود ناشناخته به عنوان سری فوریه بر بالای موجهای صفحه از شبکه هم پاسخ نشان داده می شود:

$$\mathbf{u_k} = \sum_{G,\sigma} c_{G,\sigma} \mathbf{e}_{G,\sigma} \exp(i\,\mathbf{G}\ x)$$

[1] Hermitian

که جمع بر روی همه بردارهای شبکه هم پاسخ **G** و حالات پلاریزاسیون σ است و $e_{G,\sigma}$ بردارهای پلاریزاسیون واحد است. در پیاده سازی عددی، جمعی که در راه حل قابل قبول و محاسبات $E[\mathbf{u}_k]$ ناقص است؛ یک مسأله ماتریسی حل شده با استفاده از تکنیک های تکرار شونده است. این تکنیک به عنوان روش بسط موج صفحه ای[1] مشهور است(PWE).

۴-۶-۱ محدودیت های PWE

PWE دارای دو برتری دقت و راندمان است. اگرچه روش دو اشکال دارد که استفاده کننده باید از آن آگاه باشد.

- ناتوانی در رفتار کردن با تلفات

عملگر $\hat{\mathbf{L}}$ فقط هرمیتین است اگر ماده به فرض بدون تلف باشد. روش PWE می تواند برای مواد دارای تلف مقادیر ویژه پیچیده را به نمایندگی مودهای از بین رونده محاسبه کند یا بدست آورد.

- ناتوانی در رفتار کردن با پراش

آنچنان که ما دیدیم، روش برای تعدادی از مقادیر ویژه فرکانس در بردار موج k داده شده حل می کند. به منظور کمینه کردن الگوریتم، توزیع ضریب شکست باید فرض شود که در همه فرکانس های مودها که پیدا می شود یکسان است. بالنتیجه، برای محاسبه پراش مواد این در تئوری، ممکن نیست این دو محدودیت با استفاده از الگوریتم **FDTD** برای یافتن ساختار باند قابل اجتناب است. BandSOLVE دارای توانایی است برای استفاده ابزار Rsoft'FDTD تمام موج به جای الگوریتم موج صفحه ای. ممکن است شگفت انگیز باشد که چرا FDTD روش شبیه سازی پیش فرض در BandSOLVE نیست.

[1] Plane wave expansion

فصل ۵ رسم کردن ساختارهای متناوب در RSoft CAD

۵-۱ مقدمه

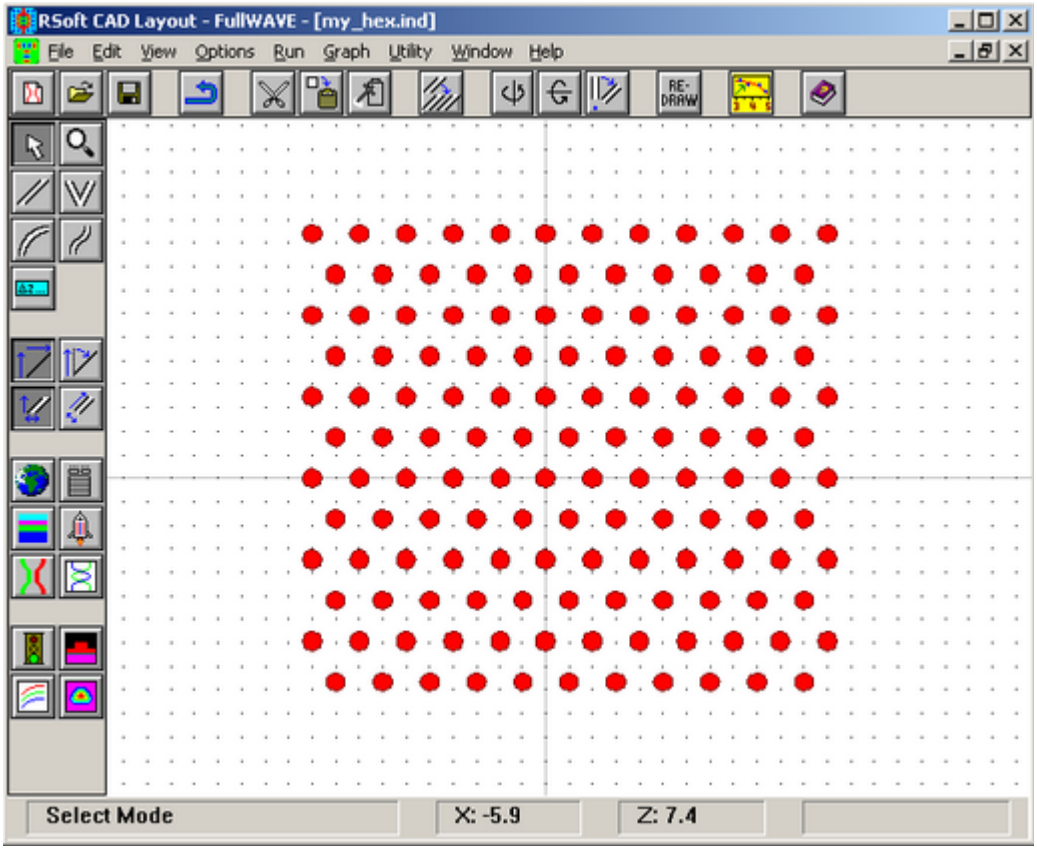
مسائل کریستال های فوتونی اغلب شامل رسم ساختارها با تکرار بسیار زیادی از عناصر در CAD می باشد. رسم اینچنین ساختارهایی از یک جزء در یک زمان خسته کننده و در معرض اشتباه است، بنابراین RSoft CAD تعدادی امکانات را برای ساده کردن فرآیند فراهم آورده است. در این فصل ، چگونگی رسم سریع طرحهای کریستال فوتونی استاندارد و نامنظم را مطرح می کنیم و تعدادی از متغیرهای symbl table را که این امکانات را پشتیبانی می کند معرفی می کنیم.

۵-۲ آرایه تسهیلات رسم و بردارهای شبکه در محیط RSoft CAD

هنگام رسم ساختارها در ابزار Rsoft CAD برای اولین بار ما به سرعت اهمیت استفاده از متغیرهای symbl table را برای تعیین خصوصیات عناصر CAD می فهمیم. به عنوان مثال، اگر طراحی تداخل سنج ماخ- زندر[1]، می توانیم یک متغیر طولی برای نشان دادن طول های دو بازو بسازیم. سپس، اگر بعداً بخواهیم طولها را تغییر دهیم، فقط symbl table را باز می کنیم و مقدار طول را تغییر می دهیم، باز کردن parameter dialogs برای هر شاخه و تغییر پارامترها برای هر شاخه به صورت جداگانه بهتر است. برای رسم شبکه شش ضلعی نشان داده شده در شکل ۱ با دست تلاش کنید .

حتی نمادهای **delta**و **width** را تعریف کنید، این فرآیند آشکارا خسته کننده است. خوشبختانه، CAD تعدادی امکانات برای به وجود آوردن ساختارهای متناوب دو و سه بعدی را فراهم می کند.

[1] Mach Zender interferometer

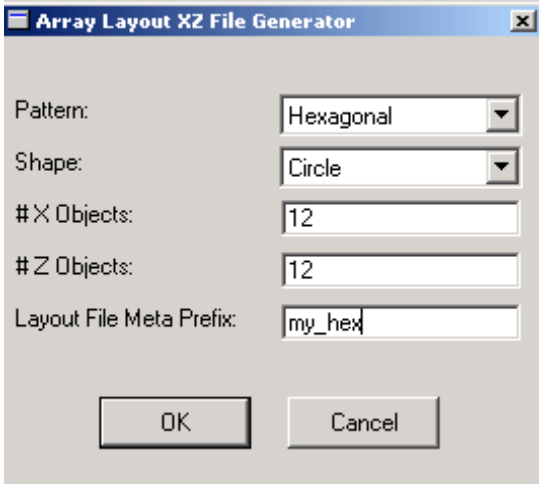


شکل ۵-۱ شبکه شش ضلعی در Rsoft CAD

۵-۲-۱ ایجاد یک آرایه شش ضلعی

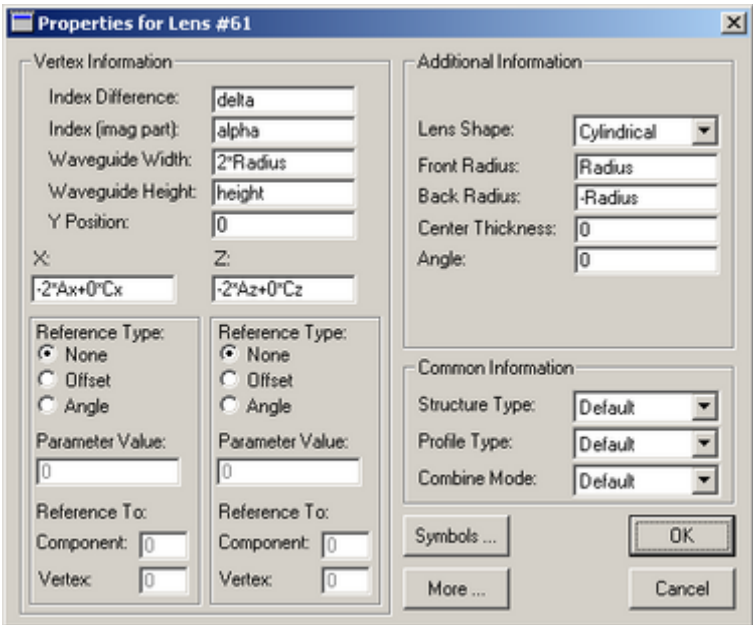
در این بخش، یک آرایه شش ضلعی شبیه شکل ۱ را می سازیم، و متغیرهایی که شکل را حمایت می کند را بررسی می کنیم.

- از ابزار RSoft CAD شروع کنید، زیر منو **Utility**، **Array layout XZ...** را انتخاب کنید. پنجره کوچکی باز می شود که ساختار پریودیک 2D را در صفحه X-Z نشان می دهد.
- تنظیمات پنجره را تغییر دهید تا مثل شکل ۲ دیده شود و **ok** کنید. اکنون CAD فایل **my_hex.ind** را می نویسد که شامل شبکه شش ضلعی ۱۲×۱۲ از دایره ها است.



شکل ۵-۲ شکل آرایه در صفحه X-Z

- آیکون **Open File** را فشار دهید. (یا Open را از منوی فایل انتخاب کنید.) و فایل **my_hex.ind** را انتخاب کنید. پنجره اصلی باید مثل شکل ۱ باشد. این ساختار آرایه شش ضلعی از میله های دی الکتریک دایره ای را با زمینه هوا نشان می دهد.
- اکنون کلیک راست روی هر کدام از لنزهای شکل کنید. پنجره خصوصیات که دیده می شود مثل شکل 3 است. به طور معمول، CAD نمادهای پیش فرض برای شاخص های مختلف، پهنا و طول تعیین کرده است. به علاوه مقادیر موقعیت X و Z، در شرایط نمادهای بردار شبکه C_z,C_x,A_y,A_x معین شده است. برای بسته شدن پنجره Cancel کنید و روی تعدادی از لنزها به صورت تصادفی کلیک راست کنید تا ببینید موقعیت هر کدام از مقادیر بردار شبکه چگونه است.



شکل ۵-۳ پارامترهای لنز های منفرد درآرایه شش ضلعی

- هر پنجره خصوصیات را که باز است اکنون ببندید و symbl table را با فشار دادن **Edit Symbols** باز کنید که پایین سمت چپ toolbar است. مقادیر نمادهای $C_x,C_y,C_z,B_x,B_y,B_z,A_x,A_y,A_z$ را امتحان کنید. آنها مقادیر زیر را دارند:

(Ax, Ay, Az)=(1, 0, 0)

(Bx, By, Bz)=(0, 1, 0)

(Cx, Cy, Cz)=(0.5, 0, 0.8660254038)

ما حروف **A**,**B**,**C** Courier درشت را برای مشخص کردن همه عناصر سه- بردار symbl table استفاده می کنیم. چنانچه انتظار داریم، بردارهای **A** و **B** دارای مقادیری از بردارهای شبکه برای یک شبکه شش ضلعی با پریود 1.0 است. توجه کنید اگرچه از symbl table برای Ay,Ax و غیره، که این مقادیر سخت- کد شده برای نمادهای بردار شبکه نیستند. در عوض، بردارها در شرایط مختلف قطبی تعیین شده است- طولهای A و C و زاویه های محوری PhiA و PhiC. نمادهای طولی A و C خودشان مربوط به نماد Period است. با این تعریف ها، در اصل می توانیم هر شبکه را در صفحه x-z تعیین کنیم، تنها با تغییر متغیرهای طول و گوشه فرمول بردارهای شبکه تغییر نمی کند. این روش، بخصوص هنگامی که ما ساختارهای 3D بررسی می کنیم مفید است.

بردار شبکه B در ساختار شش ضلعی ما یک بردار واحد درجهت y معین می کند (خـارج از صـفحه). تعیین مختصات موارد داخل شبکه x-z مورد نیاز نیست ولی برای کامل شدن شامل می شـود. توجـه کنید که بردارهای **A** و **B** و **C** ترکیب پایه ها برای فضای سه بعدی است.(استقلال- خطی[1])

۵-۲-۱-۱ تنظیم بردارهای شبکه

برای فهمیدن اینکه شبکه می تواند با متغیرهای Symbl Table، تغییـر کنـد مـوارد زیـر را امتحـان کنید.

- symbl table را باز کنید، Period را به ۲ تغییر دهید و **ok** کنید. شبکه توسط فـاکتور ۲ در همه جهات کشیده می شود.
- اکنون symbl table را باز کنید و $C = A/2$ را تنظیم کنید. شبکه در جهت Z ... می شود.
- این بار Phipattern=45 را تنظیم کنید. نمونه دست نخورده با درجه ۴۵ می چرخد.

در همه شبکه های اتوماتیک تولید شده، مقیاس کل طول توسط متغیر Period تنظیم می شود. آن با ضلع سلول واحد قراردادی مطابق است. برای شبکه شش ضلعی، فاصله بین لنزهای مجـاور است.

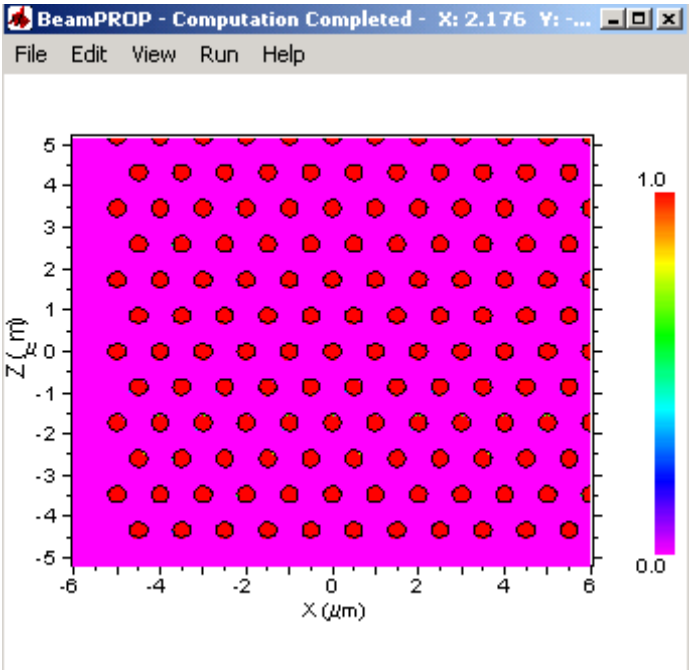
متغیرهای چرخش ThetaPattern, Phipattern (استفاده شده در مسائل 3D) می تواند در موارد ویژه مفید باشد ولی باید به 0 تنظیم شود اگر ممکن باشد، چنانچه کـه برخـی شـبیه سـازی هـای Band SOLVE برای جهت های پیش فرض کمی سریعتر است.

۵-۲-۱-۲ نمایش index profile

Index profile توسط CAD نشان داده می شود که با فشار دادن کلید profil در پایین سـمت چـپ toolbar از پنجره اصلی RsoftCAD می تواند دیده شود.

پنجره **Compute Index Profile** ظاهر مـی شـود، **Display Mode**=Contour Map (x-z) تنظـیم کنید و **ok** کنید. برای شبکه شش ضلعی بالا، Contour map مثل آنچه در شکل ۴ نشـان داده شـده است ظاهر می شود. شکل به صورت بزرگ حل شده است. آن می تواند با کاستن مقادیر **Cumpute Step** و **Slice Step** در پنجره **Compute Index Profile** بهبود یابد.

[1] Linearly-independent

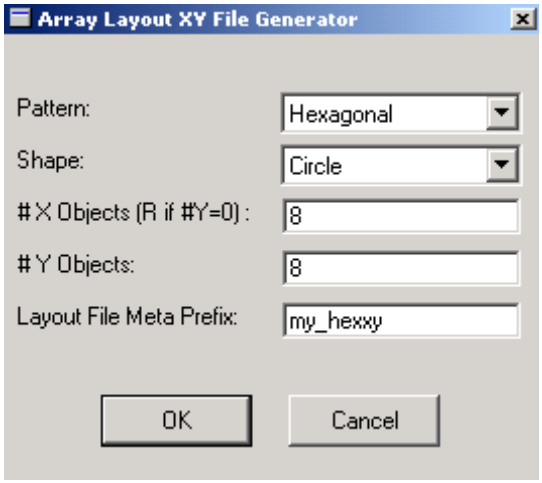


شکل ۵-۴ Index profile برای شبکه شش ضلعی X-Z

۵-۲-۲ شبکه های 2D X-Y

ما اکنون شبکه 2D دیگری را می سازیم، این بار با دوره تناوب در صفحه x-y.

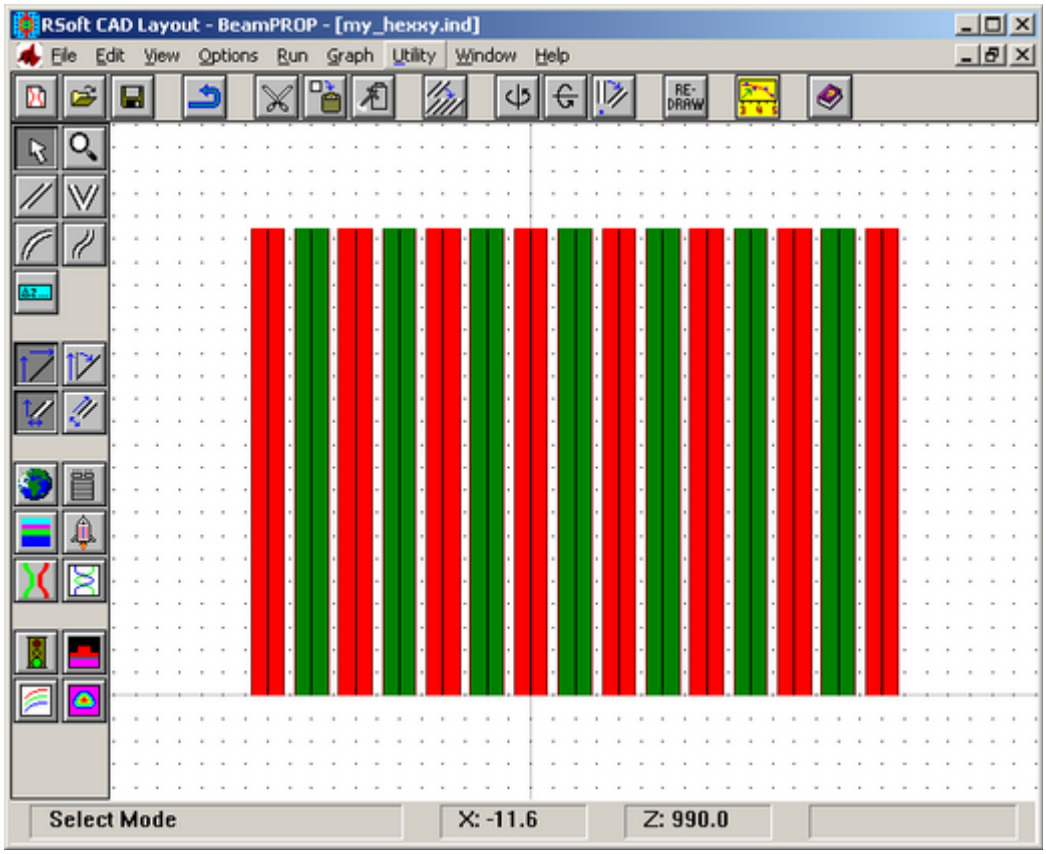
- روش مثل ساختن شبکه در x-z است به جز اینکه زیرمنو Utility، ما اکنون **Array Layout XY...** را انتخاب می کنیم. پنجره ای که ظاهر می شود در بالایش **Array Layout XY File Generator** نوشته شده است.
- مثل شکل ۵ نشان داده شده پر کنید و **ok** کنید. اکنون **File/Open** را برای تحلیل فایل جدید **my_hexxy.ind** به کار برید.



شکل ۵-۵ خصوصیات طرح آرایه XY

نتیجه رسم در شکل ۶ نشان داده شده است. در نگاه اول، شکل شبیه آرایه شش ضلعی نیست. در نگاه اول، شکل شبیه آرایه شش ضلعی نیست. اگرچه، ما آرایه x-y ساخته ایم، در Rsoft CAD، همیشه ما شکل را در صفحه x-z می بینیم. در واقع، خصوصیات آرایه یک سری از عناصر 3D از نوع **فیبر** ساخته است، که مرکزهای آنها به صورت شش ضلعی در صفحه x-y قرار گرفته است.

- برای دیدن این، **Compute Index Profile** را فشار دهید و **ok** کنید.. برنامه برشی از x-y از آرایه فیبرهای پنهان شده شکل شش ضلعی را تولید می کند.



شکل۵-۶ شکلCAD برای آرایه شش ضلعی X-Y

- به پنجره اصلی CAD بازگردید، برای امتحان کردن پنجره خصوصیات روی تعدادی از عناصر فیبر کلیک راست کنید. موقعیت های Y,X در شرایط عناصر بردارهای شبکه B,A بیان شده است، در حالیکه موقعیت Z اکنون ناچیز است و تنها طول فیبرها را تعیین می کند.

۵-۲-۲-۱ متغیرهای شبکه

تنها هنگام استفاده خصوصیات آرایه 2D ما می بینیم، متغیر پهنای شبکه به سرعت می تواند ساخته شود. مقادیر مختلف برای تنظیمات **Shape** و**Pattern** در پنجره برای ساختن آرایه x-y مکعبی و یک آرایه x-z مکعبی ترکیبی از میله های مربعی امتحان کنید.

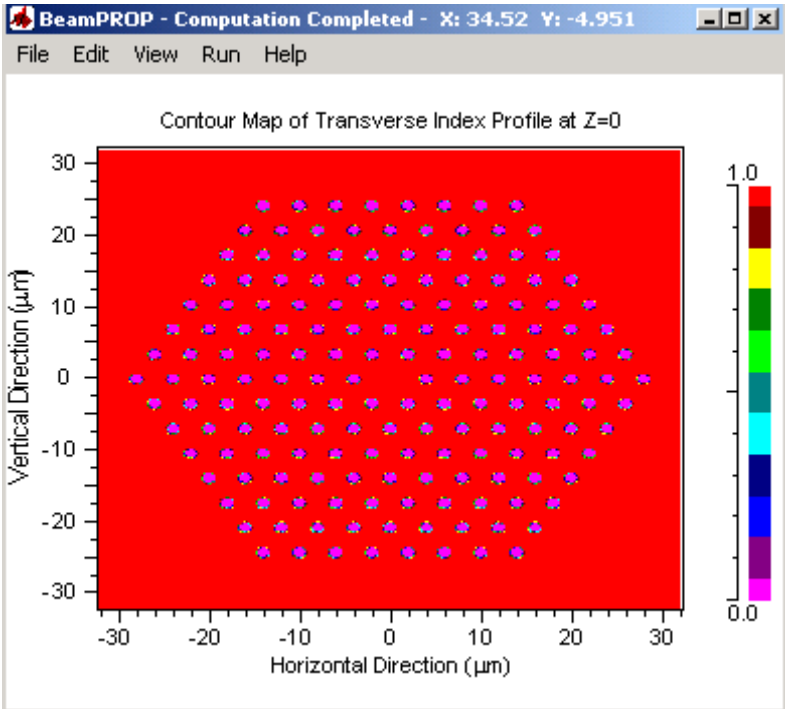
۵-۲-۳ فیبرهای کریستال فوتونی

خصوصیات آرایه XY ویژگی خاصی برای پشتیبانی طرح فیبرهای کریستال فوتونی دارد.

- ابزار رسم x-y را باز کنید.(Utility/Array LayoutXY...) این بار #X=7 و #Y=0 تنظیم کنید و پیشوند فایل را **pcf** تعیین کنید.

فایل pcf.ind را اجراا کنید. ابزار Compute Index Profile را برای دیدن آرایه کلیک کنید، index profile نشان داده شده در شکل ۷ ظاهر شده است. با Cad,#Y=0 مقدار #X را به عنوان مقدار حلقه ها نسبت به تعداد ستون ها تفسیر می کند.

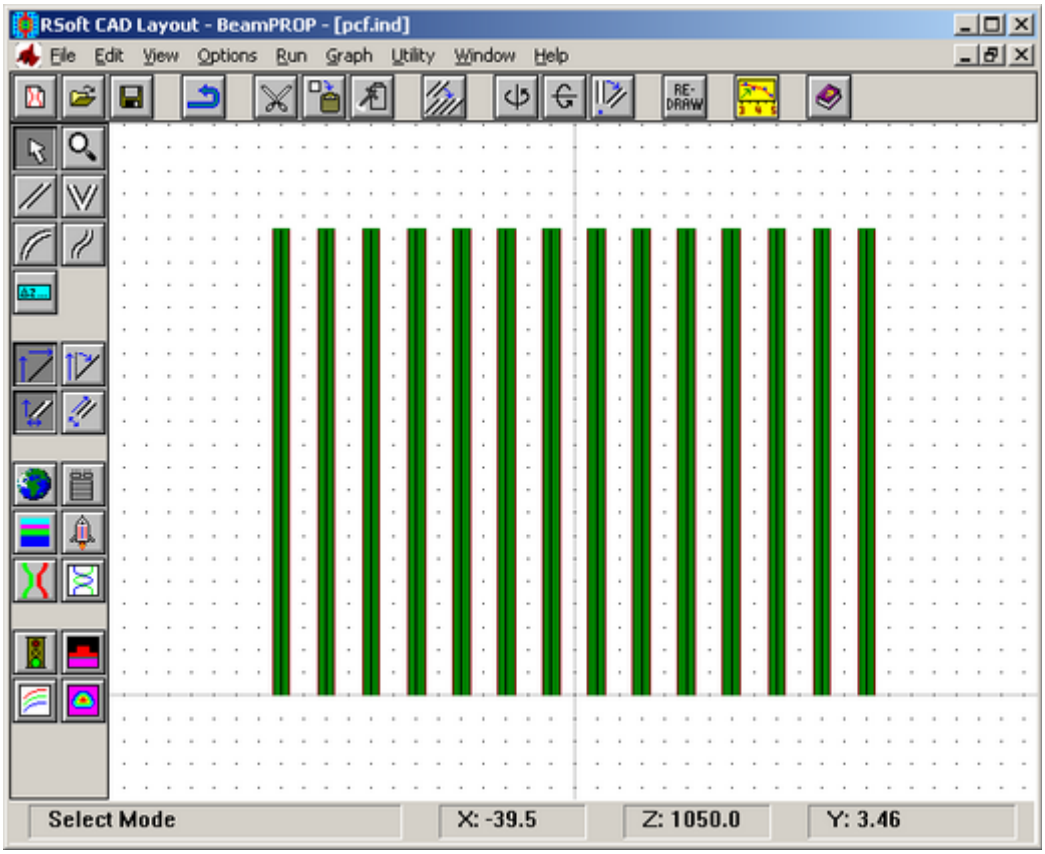
فیبر مرکزی دیده نمی شود. در واقع، عنصر CAD نشان داده شده در وسط، ولی دارای مقدار Index Difference تنظیم شده روی DeltaCore=0 است و بنابراین دارای همان ضریب شکست ماده زمینه است.



شکل ۵-۷ Index profile برای فیبر کریستال فوتونی شبکه شش ضلعی

۵-۲-۴ انتخاب عناصر در لایه های چندگانه Y

فرض کنید ما می خواهیم خصوصیات فیبر را در مبدأ فیبر کریستال فوتونی که ساخته ایم تغییر دهیم. با دید استاندارد ابزار CAD، این مشکل است، نظر به اینکه فیبرها از بسیاری مقادیر y متفاوت در بالای یکدیگر قرار می گیرد. برای انتخاب هر فیبری، ما نیاز داریم که بتوانیم آنها را در یک ارتفاع ویژه با مقدار y مجزا کنیم. این می تواند توسط فشردن کلیدهای بردار بالا و پایین هنگام گرفتن کلید Ctrl به سمت پایین انجام شود. در اولین فشار Ctrl به سمت بالا و نمایش CAD تغییر می کند بنابراین فقط آن فیبرها با طولهای نزدیک به مبدأ قابل رویت هستند.(شکل ۸ را ببینید)



شکل ۵-۸ نمایش اولین سطح فیبرها در آرایه X-Y

- فشردن پیکان Ctrl-Up مکرراً، عناصر را در سطوح مختلف در کریستال نشان می دهد، اجازه می دهد هر فیبر ویژه برای تنظیم انتخاب شود. فزایش در ارتفاع شکل جاری در قسمت راست خط پایه نشان داده می شود. افزایش در ارتفاع برای هر مرحله با متغیر symbol table cad_yselect_size که با array utility تنظیم می شود تعیین می گردد. کاربرها ممکن است این متغیر را در هر زمانی معین کنند، حتی وقتی روی ساختارهای متناوب کار نمی کنند، برای دستیابی راحت تر ساختارهای چند لایه را ببینید.
- برای بازگشت به نمایش عادی در هر زمانی، کلید Esc را فشار دهید و همه فیبرها دوباره ظاهر می شوند.

۵-۳ کشیدن ساختارهای 3D

همچنین ساختن ساختارهای 3D با پهنای متفاوت ممکن است. روش مشابه موارد 2D است بنابراین ما فقط چند مثال را مرور می کنیم.

۵-۳-۱ شبکه های مربعی از کره ها

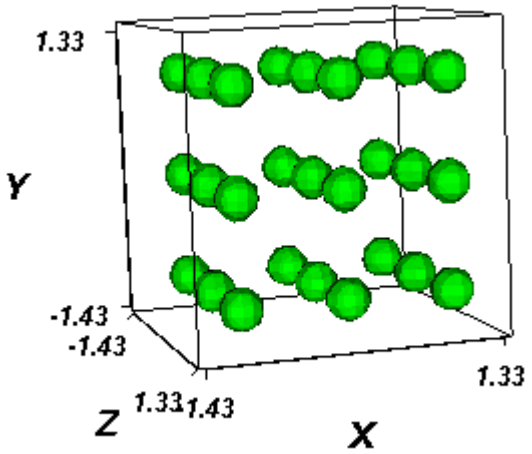
مراحل زیر را به ترتیب انجام دهید:

- **Utility/ Array Layout XYZ...** را برای باز کردن امکانات 3D استفاده کنید.
- پیشوند **cub3d** را وارد کنید و پیش فرض ها را بپذیرید.
- **File/Open** را برای اجرای فایل جدید **cub3d.ind** انتخاب کنید.
- Ctrl-Up Arrow/Down Arrow را برای دیدن ساختارها به صورت لایه لایه انتخاب کنید.
- روی هر کره کلیک راست کنید و توجه کنید که فرمول موقعیت به همه سه بردار شبکه وابسته است.

۵-۳-۲ نمایش 3D index profile

Rsoft CAD خودش نمایش 3D از Index profil را پشتیبانی نمی کند، ولی اگر ابزار MayaVi 3D viewer که در فصل ۳ توضیح داده شده است را نصب کنید، profile می تواند از طریق واسط BandSOLVE نمایش داده شود. مراحل مورد بحث، با جزئیات در فصل بعدی توضیح داده خواهد شد، و اکنون بحث در مورد آنها زود است. اکنون، دستورات زیر را دقیقاً دنبال کنید:

- Esc را برای بازگشت به CAD عادی در صورت لزوم فشار دهید.
- پنجره Global Setting را با فشار دادن نماد زمین باز کنید. BandSOLVE را برای شبیه سازی انتخاب کنید. **Ok** کنید. و دکمه **Go**(چراغ سبز ترافیک) را برای باز کردن پنجره BandSOLVE اصلی فشار دهید.
- در خط چهارم در سمت چپ پنجره، ۳ را بر هر سلول **Supercell dims** وارد کنید.
- دکمه **View Domain** را نزدیک وسط پنجره را فشار دهید. لحظه ای بعد، MayaVi باید نمایش index profile از شبکه مکعبی از کره ها را نشان دهد. تصویر شبیه شکل ۹ خواهد بود.
- با حرکت موس در پنجره MayaVi هنگام فشار دادن دکمه های موس امتحان کنید. برای چرخش تصویر(دکمه چپ) و زوم کردن(دکمه راست) و حرکت(کلید وسطی) امتحان کنید.
- MayaVi را ببیندید و سپس پنجره BandSOLVE را **Cancel** کنید. **Ok را فشار ندهید**. تا زمانیکه پنجره شروع به محاسبات ساختار باند 3D طولانی می کند.



شکل ۵-۹ Index profile برای شبکه مکعبی ساده از کره ها

۵-۳-۳ شبکه FCC از مکعب ها

- اکنون Array Layot XYZ را از Utility باز کنید.
- برای **Pattern**، FCC را انتخاب کنید و برای **Shape**، Cube را انتخاب کنید.
- پیشوند **fcc_cub** را معیین کنیدو **ok** کنید.
- فایل fcc_cub,ind را در CAD باز کنید.
- پیکان Ctrl-UpArrow/DownArrow را برای بررسی کریستال استفاده کنید. درهم آمیختگی اتم ها در لایه های پی در پی آشکار است.
- این مراحل را تحت نظر 3D Index Profile برای تولید نمایش Mayavi از index profile انجام دهید.
- شکل MayaVi را بچرخانید و به شکلهای موازی از حوزه توجه کنید. این از شکل سلول واحد شبکه FCC ناشی می شود.
- به پنجره BandSOLVE بازگردید، و در گوشه بالا- چپ، FDTD را به عنوان **Sim Method** انتخاب کنید. اکنون دوباره **View Domain** را فشار دهید.

همان ساختار اکنون در سلول مکعبی قراردادی دیده می شود. این تصویر یادآور مدل های ball-and-stick استفاده شده در کلاسهای فیزیک یا شیمی است.

۵-۳-۴ شبکه Woodpile

ساختار 3D هم در ادبیات کریستال فوتونی شبکه به اصطلاح **woodpile** نامیده می شود کـه توسـط Ho et al معرفی شده است و اولین بار در فرکانس های نوری توسط Lin e tal بررسی شده است. این ساختار از صفحات استوانه ای موازی تشکیل شده که لایه به لایه قرار گرفته است. woodpile شـامل چهارگوشه مرکزدار(FCT) متقارن است که ممکن است در شبکه Fcc که به صورت عمـودی کشـیده شود.(جهت y در BandSoLVE) طولهای سلول واحد منعارف با حرف a در صفحه افقی و حرف b در جهت عمودی برچسب دار شده است.

- در صـــفحه اصـــلی CAD، پنجـــره XYZ Array را بـــاز کنیـــد، و **pattern**=FCT و **shape**=Woodpile را انتخاب کنید. و پیشوند را **woodpile** انتخاب کنید و پنجره را ببندید و فایل **woodpile.ind** را اجرا کنید.
- این شکل کاملاً پیچیده است. توجه کنید در symbol table که متغیر phipattern=45. ایـن کل شبکه را در صفحه x-z 45 درجه می چرخاند. هر سلول واحـد شـبکه شـامل دو کانـال موجبر در گوشه های راست است. بنابراین موجبرها در دستگاه شبکه با زاویه 45° قرار گرفتـه انـد. طولهـای جـانبی سـلول واحـد قـراردادی بـا fct_a و fct_b تنظـیم شـده انـد. بـا **shape**=Woodpile، Array X-YZ utility بـا fct_a=Period*sqrt(2) تنظـیم شـده اسـت. فاکتور sqrt(2) مقـدار phiPattern=45 را متعـادل مـی کنـد بـرای مطمـئن سـاختن اینکـه همسایگی جدول ها با Period جدا می شوند.
- طول، عرض و ارتفاع **logs**، با متغیرهـای log_length، log_width، log_height از symbol table تنظیم می شود.

پارامترها را بر هر دو موجبر با جهت های مختلف توسط کلیک راست روی آنها آزمایش کنیـد. توجه کنید که راهی که متغیرهای log_length، log_width محلهایی را بین حـوزه هـا انتخـاب مـی کنند **Waveguide Width** و موقعیت نهایی z را توضیح می دهد. این لم مفیدی برای ساختن موارد مشابه درجهت های مختلف است.

در symbol table متغیر log_height به تکرار دوره تناوب در جهت y وابسته است بنابراین logs با جهت عمودی تماس می یابد. برای ساختارهایی که logs در حفره های هوا است، log_height می تواند کاهش یابد بنابراین logs تماس زیادی ندارد.

- اکنون پنجره BandSOLVE را باز کنید، **Supercell dims**= (2,2,2) تنظیم کنید و **View Domain** را برای دیدن ساختار به کـار بریـد. قـبلاً بهتـر بـود ایـن کـار را بـه وسـیله **Sim Method**=FDTD برای دیدن شکل مکعبی از ساختار انجام می دادید.

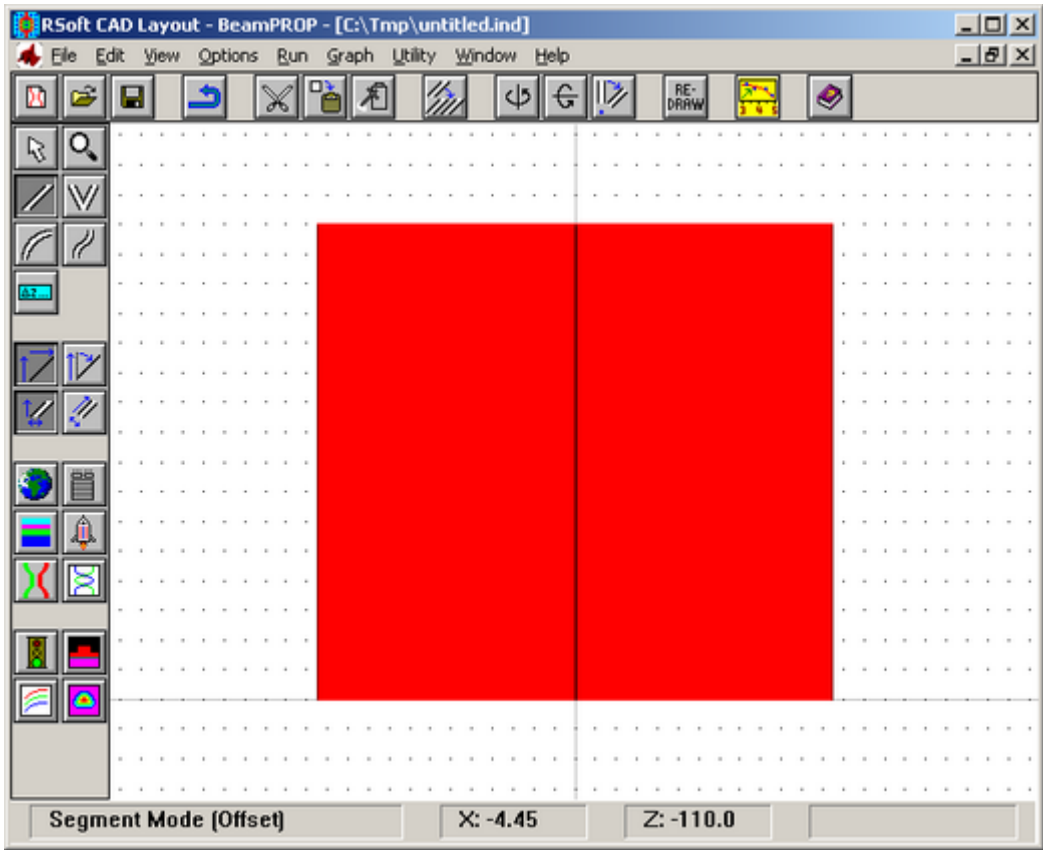
۵-۴ تعیین ساختارهای متناوب 1D و 2D با استفاده فرمول یا فایل های داده

گاهی اوقات ساختارهای متناوب با استفاده از فرمول های ریاضی نسبت به مجموعه ای از موضوعات CAD بسیار ساده بیان می شوند. برای اهداف دیگر، توزیع ضریب اختیاری که فقط به عنوان فایل شامل ستون یا ماتریس هایی از مقادیر ضریب شکست قابل عرضه است .CAD هر دو این روش ها را که ساختارها را معین می کند از طریق **User Profiles** پوشش می دهد. در واقع برای محاسبات 1D، این معمولاً ساده ترین راه است.

۵-۴-۱ ساختن 1D user Profile

1D Profile به سادگی در RsoftCAD به عنوان توزیع ضریب متقاطع از موجبر مستقیم 2D نشان داده می شود.

- مدار جدیدی با شروع CAD یا فشردن **New Circuit** در بالا سمت چپ پنجره اصلی باز کنید. در پنجره Global Setting همه پیش فرض ها را بپذیرید.
- ابزار Plain waveguide را استفاده کنید.(Segment Mode) که به صورت پیش فرض انتخاب شده است، یک موجبر که مرکزش در Y=0 و شروعش در Z=0 است را بکشید. طول موجبر مهم نیست. **View/Full** از منو که با View/Regrid دنبال شده است را انتخاب کنید. پنجره CAD مثل شکل ۱۰ باید باشد.



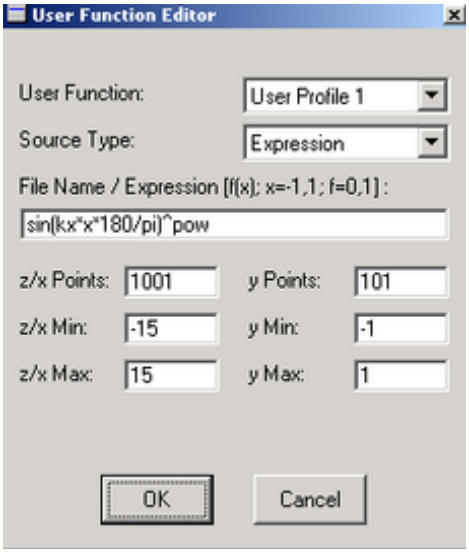
شکل ۵-۱۰ موجبر 1D profile

- در آماده سازی برای تعریف شکل، symbol table را باز کنید و متغیرهای background_index=2 و delta=1 و Period=4 و k=2*Pi/Priod، pow=6، width=2 را تعریف کنید. پس آن را ببندید.
- روی موجبر برای باز شدن پنجره Properties Dialog راست کلیک کنید، در بالا سمت چپ **Profile Type**=New Profile… انتخاب کنید. این به پنجره **User Function Editor** برای تعریف transvers index profile موجبر منجر می شود.
- **SourceType**=Expression را انتخاب کنید و در FileName/Expression Sin(k*x*180/pi)^pow را بنویسید.

این عبارت در مقیاس دامنه توسط delta و در فاصله توسط width قبل از تولید توزیع ضریب شکست مقیاس بندی شده است. در واقع توزیع ضریب شکست واقعی n=background_index+delta*f(x/(width/2)) است، که f(x)=sin(k*x*180/pi)^pow فرمولی است که ما نوشته ایم.

width=2 را تنظیم کنید و مقیاس بندی width از بین می رود. این معمولاً روش ساده ای است.

در آخر **z/x Points**=1001، **z/x Min**=-15 و **z/xMax**=15 را تنظیم کنید. تعداد نقاط، رزولوشن نمونه برداری را تنظیم می کند. پنجره باید مثل شکل ۱۱ باشد.



شکل ۵- ۱۱ تنظیمات user profile

- اکنون به پنجره اصلی CAD بازگردید و **Display Index Profile** را فشار دهید.شکل نتیجه یک موج $\sin\hat{e}6$ را با Period=4 نشان می دهد. خصوصیات شکل می تواند از طریق متغیرهای background_index و delta، Period و pow تغییر یابد.

۵-۴-۲ ساختن 2D user profile

ما می توانیم 2Dprofiles را با فرمول استفاده شده در همان تکنیک مثل مورد 1D بسازیم. روش واقعاً یکسان است اگرچه، در این بخش ما مساله مربوطه را از استفاده فایل داده برای تعیین کردن ساختار متناوب توضیح می دهیم. توجه کنید که user profile فقط جهت های 2DXY را می پذیرد.

- به فهرست <rsoft_dir>/Examples/BandSOLVE/Tutarials/Tut4 بروید.
- مثل مورد 1D شروع کنید، ولی در پنجره global settings هندسه 3D را انتخاب کنید و **BackgroundIndex**=0 و **IndexDifference**=1 و **Waveguide**=2 و **WaveguideHeight**=2 را تنظیم کنید و برای ادامه **ok** کنید.
- در پنجره اصلی CAD، موجبر مستقیم مثل مورد 1D بکشید، و پنجره User Profile را با کلیک راست روی موجبر باز کنید و **Profile Type**=New profile... انتخاب کنید.

- **Source Type**=Data File تنظیم کنید، و در edit box، prof2d.ipf وارد کنید.(این فایل در لیست Tutorial 4 قرار گرفته است).
- **z/x Max**=50 , **z/x Min**=50, **z/x Points**=201 وارد کنید.، و همان مقادیر برای متغیر y تنظیم می شود. و سپس به پنجره اصلی CAD بازگردید.
- دکمه **Display Index Profile** را برای دیدن Profile فشار دهید. تصویر نتیجه توزیع مناسب را برای فیبر کریستال فوتونی نشان می دهد.

data file می تواند هر توزیعی را شامل شود، بنابراین این روش برای توصیف شکل ها انعطاف پذیری زیادی را فراهم می کند.

ما می توانیم یک فرمول 2D بر اساس user profile توسط روش مشابه بالا را بسازیم. تنها تفاوت انتخاب نوع منبع Expression است، و یک تابع که شامل **x** و **y** در expression edit box است را استفاده کنید.

Index cut planes ۵-۵

هر طرح Rsoft CAD شامل شکل 2D یا 3D است. بنابراین شکل 1D باید به عنوان مقادیر ضریب در طول خط راست از طریق طرح 2D یا 3D??? شود. به صورت مشابه، یک شکل 2D می تواند توسط یک قسمت از شکل 3D بدست آید. جهت خط 1D یا صفحه 2D با بردارهای شبکه مساله تعیین می شود. ولی برای مشخص کردن مسائل به طور کلی، همچنین ما به انتخاب نقاطی که در قسمتی که برداشته می شود نیاز داریم. برای مثال اگر شکل 1D در طول محور Y قرر گرفته باشد، ما می توانیم خطی که در X=6 و Z=-10 قرار گرفته را تعیین کنیم. برای یک قسمت 2D در صفحه X-Y، ممکن است ما Z=5 را انتخاب کنیم. به صورت پیش فرض، BandSoLVE فرض می کند که این cutplanes در مبدأ X=Y=Z=0 قرار گرفته است، ولی آنها ممکن است بر هر مقداری تغییر کند. به عنوان مثالی برای کاربرد که این می تواند مفید باشد فیبر کریستال فوتونی باریک که در طول محور Z قرار گرفته است. با انتخابZ cut planes، mode profile و propagation Constant در موقعیت های مختلف می تواند احراز شود. پیش فرض cut planes می تواند با استفاده کنترل ها در پنجره Advanced Numeries تغییر کند.

۵-۶ استفاده بردارهای شبکه و جهت های مختصات به صورت مؤثر

در ابتدا ما دو راه کشیدن شبکه شش ضلعی را بررسی می کنیم_ با حالت متناوبی در صفحات x-z یا x-y. کاربرها ممکن است تعجب کنند که چرا ما می خواهیم هر دو گزینه را داشته باشیم، از آنجایی که جهت یابی کامل در فضا از باید هیچ تأثیری روی نتایج نداشته باشد.

در واقع، تا آنجا که نرم افزار عددی Band SOLVE مهم است، دو روش به طور کلی معادلند، و Band SOLVE ساختارهای باند یکسان برای هر دو مورد تولید می کند.

اگرچه، به خوبی پشتیبانی شکل برای محاسبات BandSOLVE، ابزار CAD مودهای دیگر شبیه سازی را پشتیبانی می کند، یعنی انتشار باریکه در Beam PRob و شبیه سازی تفاضل محدود حوزه زمان(FDTD) در تمام موج. در اکثر موارد، ما می خواهیم ساختارها را در یکی از این ابزارها به خوبی BandSOLVE بررسی کنیم.

برای مثال، مطالعه فیبرهای کریستال فوتونی را در BeamPROP ملاحظه کنید. به طوریکه ابزار انتشار یک باریکه، BeamPROP دارای یک جهت ارجح است که جهت z می باشد. آن در شبیه سازی BeamPROP است، نور بیشتر یا کمتر در جهت مثبت z حرکت می کند و تغییر ضریب در آن جهت باید کند باشد. بنابراین برای استفاده BeamPROP برای مدل سازی فیبرهای نوری، جهت انتشار فیبر باید نور یک محور z قرار گیرد، در نتیجه بخش تقاطع فیبر در صفحه x-y است. پس اگر ما فیبر کریستال فوتونی را در خارج از صفحه x-y قرار دهیم، می توانیم محاسبات خصوصیات ساختار باند را با BandSOLVE و خصوصیات انتشار از قبیل بازده تلفات یا کوپلینگ با Beam PROP، بدون تغییر طرح بندی در کل انجام دهیم. اگر ما طرح بندی x-z را برای محاسبات ساختار باند استفاده کرده بودیم، ما نمی توانسیم محاسبات BeamPROP را انجام دهیم.

از طرف دیگر، اگر ما یک موجبر کریستال فوتونی 2D برای یک مدار مجتمع پیشرفته طراحی کردیم، ما تمایل داریم به استفاده شبیه سازی FDTD برای اندازه گیری انتقال محدود سیستم که خصوصیات شکاف باند متناظر ساختار متناهی را در BandSOLVE طراحی کرده بودیم. FullWAVE فقط شبیه سازی 2D را در صفحه x-z پشتیبانی می کند و بنابراین این طرح منطقی برای انتخاب در این نمونه از مسائل است.

به طور کلی، کشیدن نمونه های مختلف مدار در یک روش ساده تر است تا دیگری، با توجه به اینکه برخی عناصر CAD فقط در روش های خاصی سودمند است. برای مثال ساختن لنزها در صفحه x-y امکان پذیر نیست.

راهنمایی های زیر را هنگام کشیدن ساختار جدید استفاده کنید:

- مدارهای مجتمع فوتونی 2D باید در صفحه x-z کشیده شوند.

- فیبرها و ساختارهای مشابه باید بخش های متقاطع آنها در صفحه x-y باشد.
- بخش متقاطع موجبرهای چند لایه پیچیده باید در صفحه x-y باشد.
- کریستال های فوتونی 3D با ساختار لایه- لایه مثل شبکه wood pile باید هر لایه جهت دار در صفحه x-z قرار گیرد.
- به یاد داشته باشید که در BandSOLVE یک مسأله فقط 3D است **اگر ساختار خودش دارای تغییر در سه جهت باشد**. انتشار خارج از صفحه 2D، یا در طول محورهای فیبر کریستال فوتونی یک مساله 2D در BandSOLVE را ارائه می دهد.

بدرستی مسائل 3D ساختارهایی هستند که شبکه های آنها دارای سه بردار اصلی می باشند، برای مثال، شبکه های الماس، FCC یا BCC و یا ساختارهای 2D با بعد سوم غیریکسان مثل کریستال 2D با ضخامت محدود.

۵-۶-۱ تعریف بردارهای شبکه

هنگام استفاده Array Layout utilities، بردارهای شبکه همیشه با استفاده از نمادهای **A**=(Ax,Ay,Az) **B**=(Bx,By,Bz) و **C**=(Cx,Cy,Cz) نمایش داده می شود. اکنون، برای ساختار مکعبی ساده با Period=1، این بردارها، بردارهای واحد کار تزین به ترتیب (1,0,0) و (0,1,0) و (0,0,1) هستند. برای شبکه های معمولی، بردارهای شبکه در جهت های دیگر قرار می گیرند. با اینحال، خیلی اوقات تصور بردارهای **A** و **B** و **C** به عنوان شبه x[1]، شبه y و شبه z مفید است. بنابراین شبکه شش ضلعی x-z با عبارت **A**=(1,0,0)(pure x), c=(0.5,0,sqrt(3)12)(بیشتر z) به طور مشابه، شبکه شش ضلعی x-y، **B** و **C** را استفاده می کند.

بسته به مورد، شما ممکن است به تعریف بردارهای شبکه خودتان نیاز داشته باشید. در صورتیکه شما هر نام متغیری که دوست داشته باشید برای نشان دادن بردارهای شبکه استفاده کنید، Band SOLVE بیشتر به صورت طبیعی کار می کند، اگر شما نمادهای استاندارد Ax و Ay و غیره را استفاده کنید و از همخوانی بالا با محورهای کارتزین پیروی کنید.

۵-۶-۲ متغیرهای دیگر

متغیر مهم در تنظیمات شبکه pbg_Layot است. این متغیر برای آگاه کردن BandSOLVE درباره شکل شبکه و کمک در اندازه گیری مسیر بردار k مناسب در میان میله های دیگر به کار می رود. آن با array generator utilities تنظیم می شود و معمولاً تغییر نمی کند. اگر شما شبکه خودتان را تعریف کنید، pbg_layout باید روی یکی از مقادیر زیر مناسب تنظیم شود:

[1] X-like

یک شبکه شش ضلعی در صفحه x-y

- PBG_LAYOUT_HEX_XY - یک شبکه شش ضلعی[1] 2D در صفحه x-y .
- PBG_LAYOUT_CUBIC_XY - یک شبکه مکعبی[2] 2D در صفحه x-y .
- PBG_LAYOUT_HEX_XZ - یک شبکه شش ضلعی 2D در صفحه x-y .
- PBG_LAYOUT_ CUBIC_XZ - یک شبکه مکعبی 2D در صفحه x-z .
- PBG_LAYOUT_CUBIC_XYZ – یک شبکه مکعبی 3D .
- PBG_LAYOUT_CUBIC_BCC - یک شبکه مکعبی پر[3].
- PBG_LAYOUT_CUBIC_FCC – یک شبکه مکعبی مراکز وجوه پر[4].
- PBG_LAYOUT_CUBIC_FCT – یک شبکه چهار گوش مراکز وجوه پر[5].
- PBG_LAYOUT_ USER - یک شبگه اختیاری[6] تعریف شده توسط کاربر.

این نکته مهم است که مقدار pbg_layout با بردارهای شبکه ای که شما تعریف کرده اید سازگار باشد. شما نمی توانید BandSOLVE را به انجام دادن محاسبات شبکه شش ضلعی حقه بزنید اگر بردارهای شبکه واقعاً مکعبی باشد فقط توسط تنظیمات pbg_layout=PBG_LAYOUT_HEX-XY.

اگر شبکه شما با هیچ هندسه استاندارد پشتیبانی شده BandSOLVE مطابقت نداشت، pbg_layout =PBG_LAYOUT_USER راتنظیم کنید.

اگر شما یک نوع شبکه دارید که فکر می کنید باید به عنوان تقارن استاندارد پشتیبانی شود با Rsoft تماس بگیرید.

۶-۵ ابزار تولید شبکه تعریف شده کاربر

در نسخه آینده BandSOLVE، آن می تواند یک شبکه با تنظیم اختیاری موارد در سلول واحد تولید شود. اگر این اهمیت دارد با Rsoft Design Group تماس بگیرید.

---

[1] Hexagonal lattice
[2] Cubic lattice
[3] Body-centerd cubic lattice
[4] Face-centered cubic lattice
[5] Face-centered tetragonal
[6] arbitary

فصل ۶ استفاده Band SOLVE:

ایجاد ساختارهای باند

در این فصل، ما چگونگی تولید ساختارهای باند پایه را در BandSOLVE نشان مـی دهـیم، توضـیح مفهوم و استفاده مهمترین تنظیمات را نشان می دهیم. ما به آرامی از طریق تولید دیاگرام بانـد بـرای یک شبکه شش ضلعی 2D ساده پیش می‌رویم.

تکنیکهای پیچیده از قبیل تحلیل های مود، بررسی و طرح ساختارهای باند در فصـل بعـدی توضـیح داده می شود.

۶-۱ تولید ساختار باند 2D

چنانچه در فصلهای نخستین نشان دادیم، تولید ساختارهای باند در BandSOLVE اغلب موضوع یک یا سه کلیک موس است، که شبکه در ابزار CAD کشیده است. این بدلیل تنظیمـات پـیش فـرض در BandSOLVE است که معمولاً مطلوب است. در این بخش، ما یک مثال را بررسی می کنیم- شـبکه شش ضلعی دو بعدی ساده- ولی از طریق همه مراحلی که در ساختن ساختار باند شامل پیش فرضها است که ممکن است بدون تغییر باقی بماند پیش می رویم.

ساختار باند از طریق مراحل زیر تولید می شود:

۱- رسم یک طرح کریستال فوتونی

۲- انتخاب BandSOLVE در ابزار طراحی

۳- انتخاب روش عددی BandSOLVE - بسط موج صفحه ای[1] یا تفاضل محدود حوزه زمان[2]

۴- انتخاب تعداد بعد برای شبیه سازی

۵- تعریف خصوصیات شبکه شامل بردارهای واحد اصلی، مرکز شبکه و ابعاد ابر سلول[3]، اگر مورد نیاز باشد.

۶- انتخاب رزولوشن عددی شبکه و پارامترهای عددی دیگر.

۷- انتخاب تعداد باندها

---

[1] Palne wave expansion
[2] Finit-difference
[3] supercell

۸- انتخاب بردار موج **k-path** از میان ناحیه بریلیون بر پایه مسیرهای اتوماتیک یا تعریف شده توسط کاربرد

۹- انتخاب پلاریزاسیون محاسبات

۱۰- فعال کردن هر خصوصیت ویژه از قبیل خروجی مود شکلها، محاسبات مؤثر یا گروه ضرایب شکست و غیره

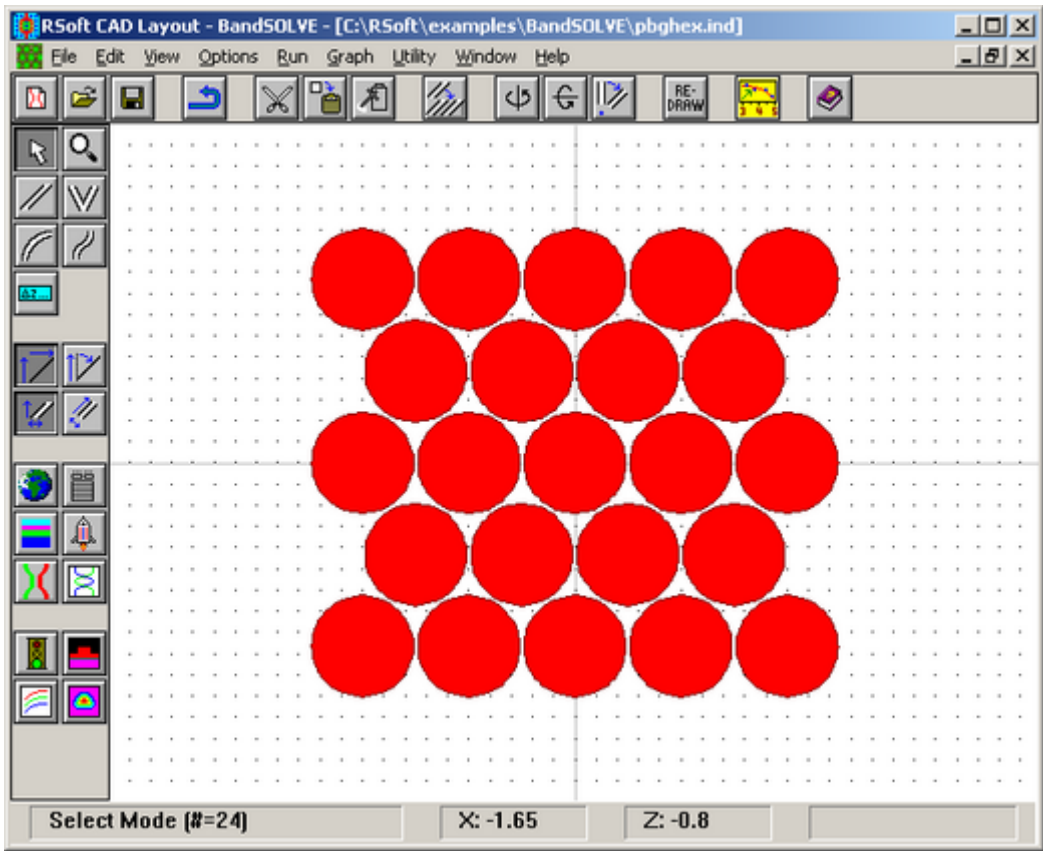
۱۱- شروع محاسبات

بیشتر این مراحل جزئی است یا نیاز به کاری ندارد چون پیش فرض ها درست است.

اکنون ما از طریق هر یک از این مراحل با جزئیات پیش می رویم.

۶-۱-۱ مرحله ۱: رسم یک طرح کریستال فوتونی

این قسمت از مسأله با جزئیات در فصل ۴ تحت پوشش قرار داده شده است. BeamPROP را شروع کنید و فایل **<rsoft_dir>Examples/BandSOLVE/pbghex.ind**, را اجرا کنید. صفحه باید مثل شکل زیر شود:



شکل ۶-۱ طرح شش ضلعی 2D

این فایل با استفاده از Array Layout XZ utility ساخته شده است . اگر شما احساس می کنید که خودتان برای ساختن این طرح مطمئن نیستید، باید فصل ۴ را بخوانید و قبل از ادامه دادن بفهمید.

۶-۱-۲ مرحله۲ : انتخاب BandSOLVE بعنوان ابزار طراحی

ابزار RSoft CAD طراحی CAD را برای تعدادی از ابزارهای مختلف پشتیبانی می کند. علاوه بر BandSOLVE، ابزار CAD همچنین شبیه سازی را با FullWAVE(تفاضل محدود حوزه زمان)، Grating MOD(طراحی ساختارهای Brogg grating) و BeamPROP(انتشار باریکه) کنترل می کند.(شما ممکن است همه این ابزارها را خریداری نکرده باشید.)

CAD با هر یک از این ابزارها آموزش داده می شود شما باید ساختار خودتان را بررسی کنید. این اطمینان می دهد که هنگامی که شما دکمه چراغ سبز ترافیک را فشار می دهید، پنجره شبیه سازی برای ابزار صحیح ظاهر می شود. به صورت پیش فرض، ابزار نشان داده شده انتشار باریکه با Beam PROP است. برای بیشتر ساختاهای متناوب، این مناسب نیست.(استثناء مهم طرح فیبر کریستال فوتونی است.)

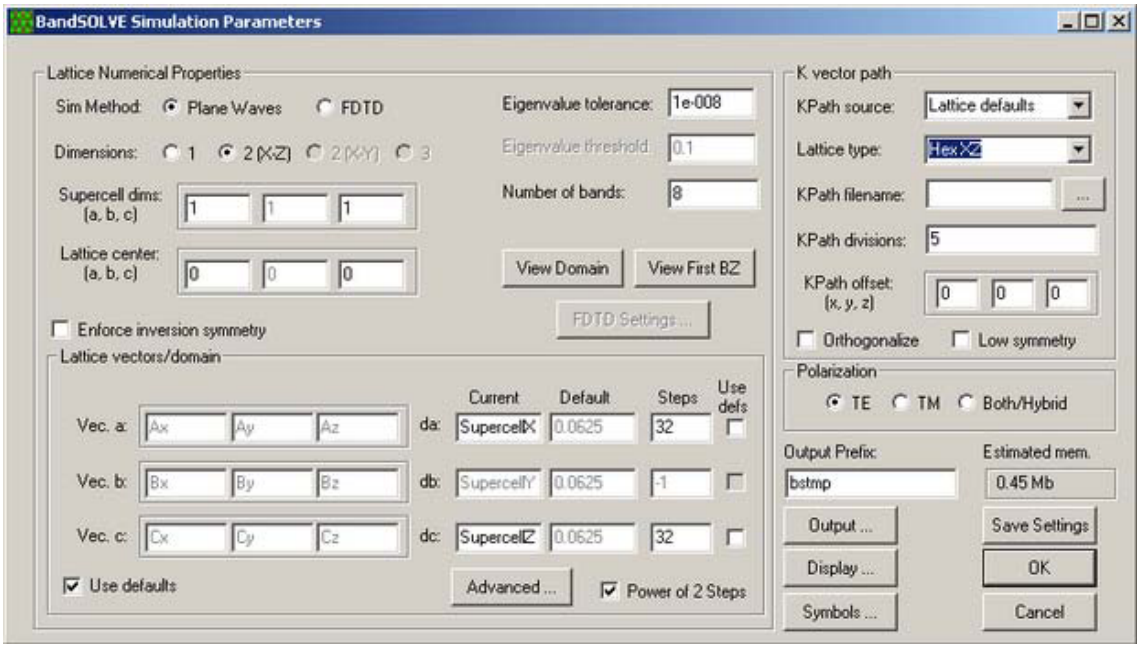
برای تغییر این تنظیمات، پنجره Global Setting را با فشردن نماد زمین در قسمت چپ toolbar باز کنید. در این پنجره که ظاهر می شود، انتخاب ابزار شبیه سازی در بالا است. دایره ای که با BandSOLVE برچسب دار شده را علامت بزنید و سپس برای بازگشتن به پنجره اصلی**ok** کنید.

دکمه **Go** اکنون BandSOLVE را اجرا خواهد کرد مگر اینکه شبیه سازی دوباره تغییر کند.

توجه کنید که در فایلهای مثال که با BandSOLVE تهیه شده، این تنظیمات ساخته شده است، اگرچه شما باید این انتخاب را در طرحهای خود اعمال کنید.

۶-۱-۳ مرحله ۳ : انتخاب روش عددی BandSOLVE

اکنون ما پنجره BandSOLVE اصلی را با انتخاب **BandSOLVE BandStructure Calculation** از منوی Utilities باز می کنیم. پنجره باز شده شبیه زیر است:



شکل ۶-۲ پنجره اصلی BandSOLVE

همه تنظیمات برای ساختن دیاگرام باند که قرار گرفته اند در این پنجره لازم است. در بالا، چپ، ما می توانیم **Sim Method** را که Plane Waves(به عنوان پیش فرض) یا FDTD مشخص می کنیم. دلیل اصلی برای انتخاب روش FDTD محاسبه تلفات یا پراش در کریستال است، که نمی تواند در روش Plane Waves شامل شود. روش FDTD همچنین ممکن است در جداسازی برخی مودها در تعداد باندهای زیاد سریع تر باشد.(چند صد باند).

برای موارد دیگر، روش plane waves سریع تر، دقیق تر است و به BandSOLVE اجازه می دهد که شکاف های باند را به صورت اتوماتیک مشخص کند. اگر بالاخره، شما روش FDTD را استفاده می کنید، همیشه باید محاسبات مقدماتی را با روش plane waves برای اثبات رفتار پایه ای انجام دهید.

بنابراین، ما **Sim Method** را بدون تغییر روی Plane Waves قرار می دهیم.

۶-۱-۴ مرحله ۴ : انتخاب تعداد بعد

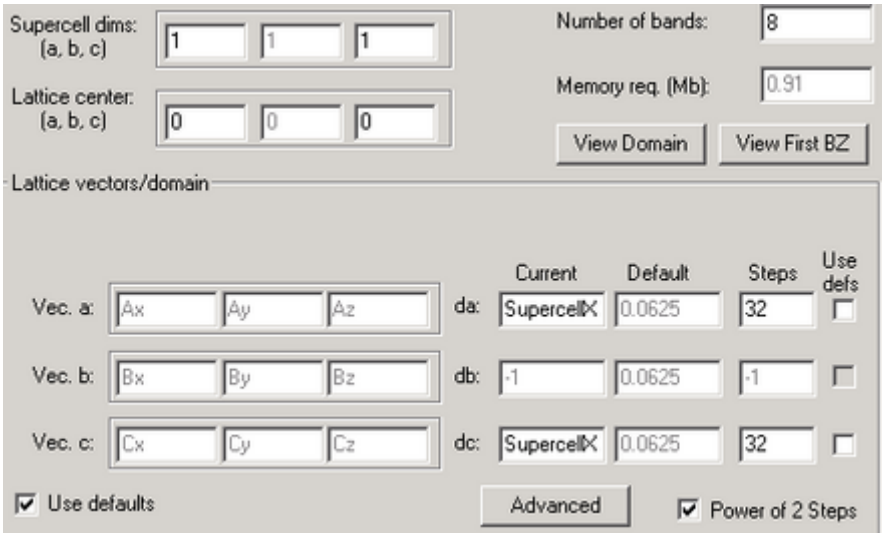
فوراً زیر تنظیم **Sim Method**، تعداد ابعاد برای شبیه سازی را انتخاب می کنیم. توجه کنید Band SOLVE بین محاسبات 2D در صفحه XZ و محاسبات در XY تفاوت قائل می شود. چنانچه در فصل ۴ توضیح داده شده است، اگر ساختارها به صورت یکسان در صفحات XZ یا XY کشیده شده باشد تفاوتی در نتایج وجود ندارد ، ولی ساختارهای ویژه به طور طبیعی در یک روش یا دیگری در Beam PROP CAD کشیده می شوند.

در این مورد، از آنجایی که ساختارهای شش ضلعی ترکیبی از لنزها در صفحه XZ هستند، فقطانتخاب های 1D و2D(X-Z) قابل استفاده است. ما تحلیلهای 1D را نمی خواهیم، بنابراین این گزینه بدون تغییر باقی می ماند.

توجه کنید که اگر **Sim Method** موقتاً به FDTD تغییر یابد، گزینه 1D غیرفعال می شود. در مواقع FullWAVE فقط می تواند در مورد ساختارهای (X-Z) 2D و 3D بحث کند. این محدودیت در روش plane wave وجود ندارد. مطمئن شوید که **Sim Method** روی plane wave بازگردانده شده است.

۶-۱-۵ مرحله ۵ : تعریف خصوصیات شبکه

در این مرحله، ما حوزه تناوب را که محاسبات BandSOLVE در آن عمل می کندتعریف می کنیم. تنظمیات مناسب در بخش چپ پایین پنجره مثل این است:



شکل ۸-۳ تنظیمات شبکه عددی

محرک

در نگاه اول، تعیین شبکه ممکن است غیرضروری به نظر برسد. ما قبلاً یک شبکه را در کشیدن ساختار در مرحله ۱ مشخص کردیم، و احتمالاً ما نباید آن را دوباره انجام دهیم. در واقع، برای حالت ساده از یافتن ساختار باند از کریستال متناوب کامل، این درست است که رفتار پیش فرض Band SOLVE را درخصوصیات شبکه از شکل به پنجره کپی کنیم.

ولی موارد بسیاری وجود دارد که رفتار درست نیست. به طور آشکار، برای مسائل با عیب، ما به تعریف ابر سلول نیاز داریم بنابراین حوزه محاسبات نسبت به یک سلول واحد منفرد از کریستال کشیده شده

در CADخیلی بزرگتر خواهد بود. در برخی موارد، ابرسلول ممکن است فقط نسخه بزرگتر سلول واحد کشیده شده اصلی باشد. مثلاً یک مجموعه ۵×۵ از سلولهای واحد شش ضلعی.

در بیشتر موارد، اگرچه حوزه عددی شکل یکسانی مثل ساختار فیزیکی ندارد. برای مثال، آن اغلب برای مدل کردن یک فیبر کریستال فوتونی در حوزه مربعی مناسب است حتی با اینکه بخش متقاطع آن شامل شبکه شش ضلعی باشد..

بنابراین، در BandSOLVE ما بین شبکه فیزیکی از طرح(با بردارهای symbol table، **A** و **B** و**C** وغیر نشان داده می شود) و شبکه عددی استفاده شده در محاسبات تمایز قائل می شویم. در واقع، هنگامی که شبکه عددی همیشه متناوب است تا زمانیکه BandSOLVE بر فرض شرایط مرزی متناوب تکیه می کند، توزیع ضریب فیزیکی به طور کلی به حالت تناوبی نیاز ندارد. بنابراین، در تئوری، BandSOLVE می تواند برای یافتن مودهای موجبر فیبرهای تک مود[1] استاندارد استفاده شود. در عمل، برای این چنین ساختار ساده آن می تواند بیشتر مؤثر باشد برای استفاده ابزار دیگری نظیر الگوریتم یافتن مود Beam PROP.

تنظیمات شبکه

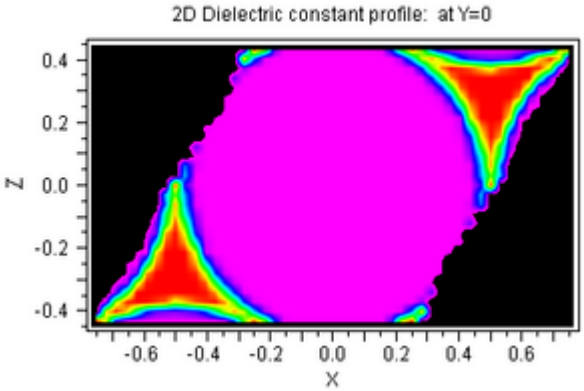
اکنون ما در مورد هر کدام از تنظیمات نشان داده شده در شکل 3، که برای نشان دادن شبکه عددی استفاده می شود بحث می کنیم.

- Vec a,Vec b,Vec c

این پارامترها بردارهای واحد اولیه شبکه عددی را تعیین می کنند که ما با حروف درشت **c**,**b**,**a** در قسمت پایین مشخص می کنیم. بیاد بیاورید که بردارهای شبکه برای طرح با حروف بزرگ **C**,**B**,**A** مشخص می شوند.

به واسطه پیش فرض، بردارهای شبکه عددی با مقادیر شکل متناظر پر می شود. بنابراین تنظیمات پیش فرض یک سلول واحد اولیه منفرد از شبکه کشیده شده را توضیح می دهد. ما می توانیم حوزه جاری را در هر زمانی با فشردن دکمه **View Domain** چک کنیم.(نزدیک مرکز پنجره) با تنظیمات پیش فرض برای شبکه شش ضلعی ما، طرح نتیجه مثل شکل متوازی الاضلاع سلول واحد است.

[1] Single mode

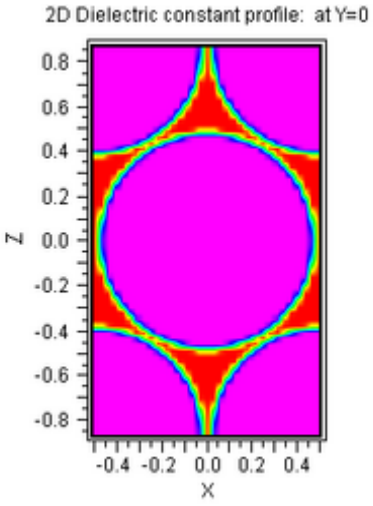


شکل ۶-۴ حوزه پیش فرض برای شبکه شش ضلعی

- برای تغییر مقادیر پیش فرض برای بردارهای شبکه، گزینه **Use defaults**(در پایین پنجره) باید علامت انتخابش برداشته شود. اکنون امتحان کنید.

با **Use defaults** غیرفعال، تعدادی از پارامترهای بردار شبکه قابل تغییر می شوند. توجه کنید که تا زمانیکه ما در مود 2DXZ هستیم، فقط بردارهای **a** و **c** قابل تغییر هستند. به صورت مشابه، برای ساختار 2DXY، فقط بردارهای **a** و **b** قابل تغییر هستند. پارامترهای بردارهای a و c را تغییر دهید، بنابراین **a**=(1,0,0) و **c**=(0,0,1) و سپس دکمه **View Domain** را فشار دهید. توجه کنید که حوزه(سلول واحد شبکه عددی) اکنون دارای شکل مکعبی است و سلول با حالت تناوبی شبکه متناقض است.

ما می توانیم یک سلول مکعبی را بیابیم که با حالت تناوبی شبکه شش ضلعی مطابق است توسط تنظیمات**a**=(Domain X,0,0) و **c**=(0,0,DomainZ). حوزه اکنون مثل این است:



شکل ۶-۵

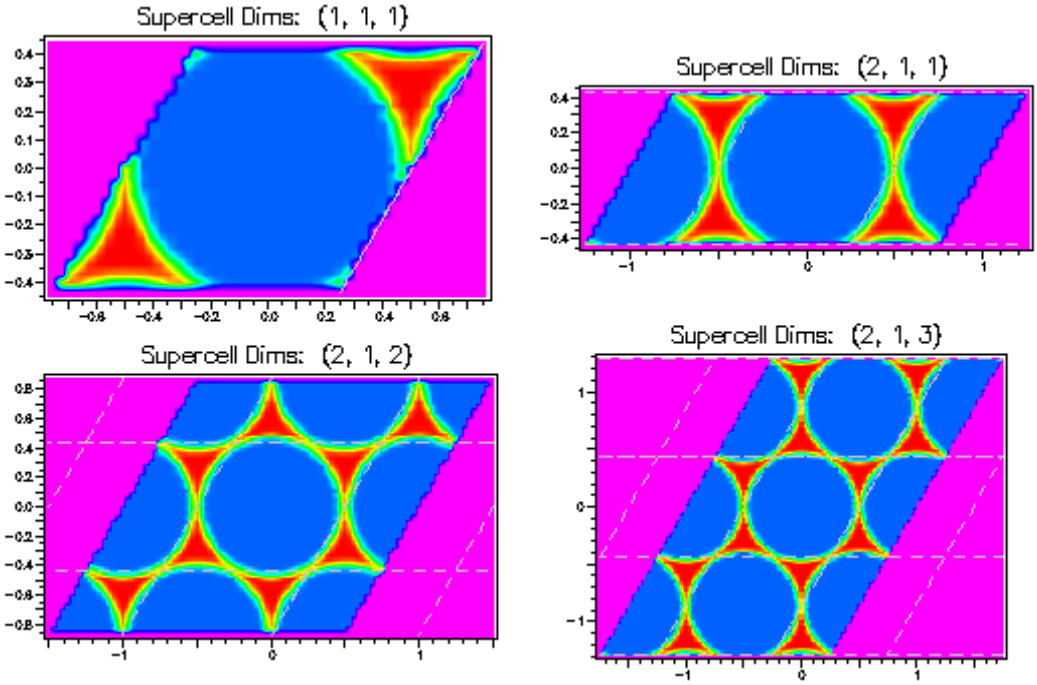
این نمونه از حوزه برای شبیه سازی FDTD از شبکه های غیرمکعبی استفاده مـی شـود تـا زمانیکـه FullWAVE به حوزه مثلثی نیاز دارد. array utilities همیشه نمادهـای DomainX و DomainY و DomainZ را برای رسیدن به این هدف تعریف می کند.

دنبال کردن گریز زیر، ما مشاهده می کنیم که تنظیمات پیش فـرض بـرای محاسـبات سـاختار بانـد کریستال شش ضلعی کامـل مناسـب اسـت. بنـابراین گزینـه **Use defaults** را بـرای ذخیـره سـازی تنظمیات اصلی فعال کنید.

- **Supercell dims**

این حوزه اندازه کلی حوزه عددی را با انتخاب تعداد سلولهای واحد اولیه شبکه عددی تنظیم می کند، به صورت دیگر، نظر به اینکه بردارهای شبکه فقط در مورد تعیین اندازه شکل های سلول واحد اولیـه منفرد از شبکه عددی بحث می کند، **Superell dims** تعداد تکرار سلول واحد اولیه را در هر جهـت تعیین می کند.

این با انتخاب متنوع تنظیمات supercell dims و استفاده **View Domain** بـرای دیـدن نتـایج بهتـر فهمیده می شود:



شکل ۶-۶

در بیشتر موارد مقادیر **Super dims** باید عدد صحیح باشند، ولی این لازم نیست.

- **Lattice center**

این پارامتر مرکز حوزه را در بردارهای شبکه چندگانه تغییر می دهد. این اگر **Lattice center**=(na,nb,nc)، مرکز حوزه در نقطه (na **a**+nb **b**+nc **c**) است.

۶-۱-۶ مرحله ۶ : رزولوشن شبکه وخصوصیات عددی

رزولوشن عددی شبکه توسط پارامترهای تنظیمات بردار شبکه کنترل می شود. چنانچه با هر ابزار عددی، استفاده پالاینده شبکه عددی صحت محاسبات را در مصرف زمان لازم افزایش می دهد. در واقع با روش PWE، زمان محاسبات به سرعت با تعداد نقاط افزایش می یابد، بنابراین بهتر است که با یک رزولوشن خوش بینانه آغاز کنید و آن را در صورت نیاز برای بدست آوردن نتایج سازگار کم کنید.

رزولوشن ممکن است با انتخاب اندازه مرحله یا تعداد مراحل برای هر بردار شبکه تنظیم شود. اندازه مرحله با سه میدان در زیر کلمه **Current** در شکل ۳ کنترل می شود، تا زمانیکه تعداد مراحل با میدانهای تحت کلمه **Steps** تنظیم می شود. پنجره برنامه ریزی شده است بنابر این تغییر در هر دو

اندازه یا تعداد مراحل میدان دیگری را موجب می شود که به روز درآمده است. توسط پیش فرض، برنامه تعداد مراحل را به نزدیک ترین توان ۲ گرد می کند، چون که دستورالعمل تبدیل فوریه سریع استفاده شده توسط BandSOLVEبرای آرایه هایی که در طول آنها توانی از ۲ است سریعتر اجرا می شود. این رفتار می تواند با مربع تنظیم **Powerof 2 Steps** غیرفعال شود. گرچه، برنامه همیشه اندازه مرحله را با عدد صحیح مناسب با طول بردار شبکه منطبق می کند.

پارامترهای عددی دیگر فقط نیازمند عملیات PWE است که برای الگوریتم کمینه سازی خطای مجاز(تلرانس)[1] همگرایی است. این با پارامتر **Eigenvalue tolerance** کنترل می شود.(مرکز و بالای پنجره اصلی در شکل ۳). برای مسائل نمونه، مقدار در محدوده 10^{-5}-10^{-8} مناسب است. برای مسائل چالش انگیز با باندهای زیاد یا مقادیر ویژه جمع شده زیاد این ممکن است نیازمند کاهش تا 10^{-10} یا حتی کمتر باشد. یک علامت که تلرانس به کاهش نیاز دارد این است که اگر باندها **out- of- order** پیدا شود، که در ساختارهای باند به عنوان باندهایی که ناگهان متقاطع شده اند ظاهرمی شود.

تنظیمات پیش فرض برای همه پارامترهای عددی برای مثال شبکه شش ضلعی قابل قبول است.

۶-۱-۷ مرحله ۷ : انتخاب تعداد باندها

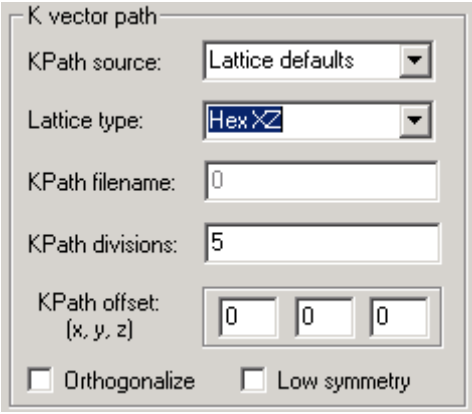
BandSOLVE باندها را از کمترین مقادیر مشخصه به طرف بالا مشخص می کند. تعداد باندهای مشخص شده(تعداد مقادیر ویژه هر نقطه بردار k) با پارامتر **Number of bands** تنظیم می شود. تعداد باندها نیازمند افزایش در مسائل ابرسلول ناشی از band-flding است. برای مثال، اگر شکاف بین باندهای 3 و 4 اتفاق بیافتد، در یک کریستال کامل، سپس در مساله ابرسلول ۵×۵ به کار برده شده برای همان شبکه، شکاف بین باندهای 3×5×5=75 و 76 ظاهر می شود. بنابراین مسائل ابرسلول می تواند طول محاسبات افزایش پیدا کند چون هر دو تعداد نقاط شبکه و تعداد باندهای مورد نیاز در نسبت تعداد ابرسلول ها افزایش می یابد.

۶-۱-۸ مرحله ۸: انتخاب بردار موج k-path

تنظیمات توسط **k**-vector path به هم مربوط می شوند که در بالا سمت راست پنجره قرار گرفته اند.

اکنون ما هر کدام از این کنترل کننده ها را توضیح می دهیم:

[1] tolerance



شکل ۶-۷ تنظیم k path vector

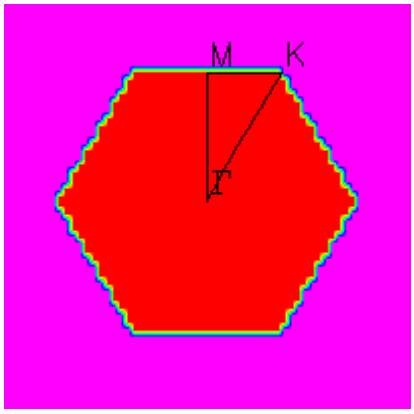
KPath Source

مسیر از طریق ناحیه بریلیون مشخص می شودکه در میدان **k path source** چهار مقدار امکان پـذیر وجود دارد:

- **Lattice defaults**(تنظیمات پیش فرض)

این **k**-path استاندارد را برای شبکه عددی چنانچه با میدانهای **Vec** توصیف کننده شبکه تعریف شده را مشخص می کند و تنظیمات **Lattice type** فوراً زیر تنظیمات **KPath Source** آمده اسـت. بـرای مثال، اگر یک شبکه عددی مکعبی برای بررسـی مودهـای معیـوب در شـبکه شـش ضـلعی اسـتفاده میشود، **k**-path مناسب برای ابر سلول مکعبی است. مسیر با حروفی که بـه طـور معمـول در ادبیـات استاندارد است برچسب دار شده است. این تنظیمات معمـولاً بـرای تحلیـل سـاختارهای بانـد هـر دو ساختارهای کاملا" متناوب و ساختارهای معیوب استفاده شده در ابر سلول ها مناسب است.

ناحیه بریلیون و **k**-path مطابق تنظیمات جاری ممکن است در هر زمانی بـا فشـردن دکمـه **View First BZ** مشاهده شود. در این مورد شکل شبیه زیر است:



شکل ۶-۸ ناحیه بریلیون و kpath برای شبکه شش ضلعی 2D

- File

کاربر ممکن است یک **k-path** اختیاری که فایل ساده ASCII را استفاده کرده تعیین کند. فایل همچنین می تواند شامل نمادها برای مشخص کردن نقاط مورد علاقه ناحیه بریلیون باشد. اسم فایل در پارامتر **kPath filename** مشخص شده است.

- Single value

محاسبات در یک مقدار منفرد ازبردار موج انجام می شود. این ویژگی معمولاً برای یافتن مودهای معیوب در محاسبات ابرسلول استفاده می شود. اگر ابر سلول به اندازه کافی بزرگ باشد، مد معیوب باید با **flat band** فرکانس ثابت تقریبی نشان داده شود. در آن مورد، مسأله فقط نیاز دارد که در یک نقطه حل شود، به طور نمونه مبدأ یا نقطه Γ از شبکه معکوس.

برای این مود، مقدار بردار موج به عنوان بردار در پارامتر **kpath offset** تعیین می شود.

Lattice Type

پارامتر **Lattice type** برای تعیین کلاس عمومی شبکه عددی به کار می رود اگر **KPath source**=Lattice Defaults باشد بنابراین BandSOLVE می تواند به طور اتوماتیک **k-path** مناسب را تعیین کند. توسط پیش فرض، آن از متغیر symbol table، pbg_layout تنظیم می شود. بنابراین آن با شکل شبکه از ساختار در CAD مطابقت دارد. این تنظیمات معمولاً باید فقط هنگامی تغییر کند که شبکه عددی در شکل از شبکه طرح شده تفاوت دارد. برای مثال، اگر شبکه شش ضلعی در حوزه مکعبی مدل شود، ما باید **Lattice Type**=cubice را تنظیم کنیم.

توجه کنید که این پارامتر واقعاً شکل حوزه عددی را تغییر **نمی دهد**. حوزه همیشه با بردارهای شبکه عددی تعیین می شود.

KPath divisions

میدان **KPath divisions** تراکم نقاط در طول **K-path** را تعیین می کند. هر بخش مسیر بین نقاط متقارن پی در پی در نقاط **KPath divisions** نمونه برداری می شود. برای عملکرد معمولی، یک

مقدار از نقاط ۵ تا ۱۰ ساختارهای باند مفید تولید می کند. برای برخی ساختارها، لبه های باند در نقاط متقارن برچسب دار اتفاق نمی افتد، و تعداد ناکافی از بخش ها می تواند اندازه شکاف ها را زیاد برآورده کند. مقدار ۱۰ بخش باید برای تعیین کردن کافی باشد اگر لبه های باند در نقاط متقارن یا در طول مسیر بین آنها اتفاق بیافتد. اگر دومی باشد، تعداد بخشها می تواند برای محاسبات دقیق نهایی افزایش یابد.

kPath filename

این میدان نام تعیین شده کاربر برای فایل K-path را تنظیم می کند: اگر**KPath source**=File

KPath offset and orthogonalization

در همه مدها به غیر از **KPath source**=single value به مقدار **KPath offset** به هر نقطه در طول **K**-path اضافه می شود. این ظاهراً قابلیت عجیب دارای استفاده کمی در یافتن ساختارهای باند منفرد است، ولی در انجام بررسی های مختلف کمک بزرگی است. برای مثال، برای یافتن ساختارهای باند فیبر کریستال فوتونی که ثابت انتشار kz مختلف است، ما می توانیم **KPath offset**=(0, 0, kz) را تنظیم کنیم و سپس مقدار kz را بررسی می کنیم. **K**-path همچنین **orthogonalized است** برخلاف مقدار **KPath offset** ، از قبل به مسیر اضافه شده است. این برای ساختن ساختارهای باند مهم است.

توجه: **K**-path orthogonalization فقط در مودهای 1D و 2D پشتیبانی می شود.

low symmetry

اگر محتویات سلول واحد دارای متقارن کمتری نسبت به شبکه خودش باشد ، استفاده **K**-path طولانی تر ضروری است. **K**-path جدید کپی های متعددی از بخش غیرقابل ساده شدن ناحیه بریلیون را نمونه برداری می کند. برای مثال، اگر شما برای حفره های بیضی در شبکه مکعبی حل می کنید، این گزینه باید انتخاب شود.

برای مثال جاری، پیش فرض ها برای همه تنظیمات KPath درست است و نیاز به تغییر نیست.

۶-۱-۹ مرحله ۹: انتخاب پلاریزاسیون محاسبات

تنظیمات پلاریزاسیون برای محاسبات مستقیماً زیر تنظیمات KPath قرار گرفته است.

برای مسائل 3D، بردار معادله هلم هولتز به معادلات برای پلاریزاسیون های مختلف تفکیک پذیر نیست و همه مدها **هایبرید** است. اگرچه، برای مسائل 2D، که در آن بردار موج **k** در صفحه شبکه قرار می گیرد، بردار معادله هلم هولتز راه حل های مجزا را برای پلاریزاسیون TE و TM پشتیبانی می کند. برای این چنین مسائل، BandSOLVE گزینه حل فقط TE، فقط TN یا Both مود را فراهم می

کند. BandSOLVE به صورت اتوماتیک اخطار می دهد اگر **K**-path شامل اجزاء out-of-plane باشد و گزینه های TE و TM را غیرفعال می کند.

برای مثال ما, تنظیمات Both/Hybrid را انتخاب خواهیم کرد. از آنجایی که این یک مسأله 2D با بردارهای موج صفحه ای است، خروجی شامل هر دو نتایج TE و TM است.

توجه در مورد قرارداد پلاریزاسیون: برای مسائل 2D، BandSOLVE قراردادی را به کار می برد که پلاریزاسیون TE مطابق میدان الکتریکی نقطه گذاری شده خارج از صفحه 2D و میدان مغناطیسی قرار گرفته در صفحه است. برای پلاریزاسیون TM، میدان مغناطیسی به خارج صفحه نشانه گذاری می شود. این قرارداد متضاد است با آنچه در بسیاری از مقالات کریستال فوتونی استفاده می شود، و برای مطابقت با قرارداد استفاده شده در BeamPROP و FullWAVE انتخاب شده است. این قرارداد، قرارداد معمولی برای موجبرهای نوری است. در هر ارزیابی، از آنجایی که قانون ثابتی در ادبیات کریستال فوتونی وجود ندارد، ما باید به یاد داشته باشیم که همیشه با تنظیمات مناسب تطبیق دهیم.

۶-۱-۱۰ مرحله ۱۰: فعال کردن خروجی مود و ویژگیهای دیگر

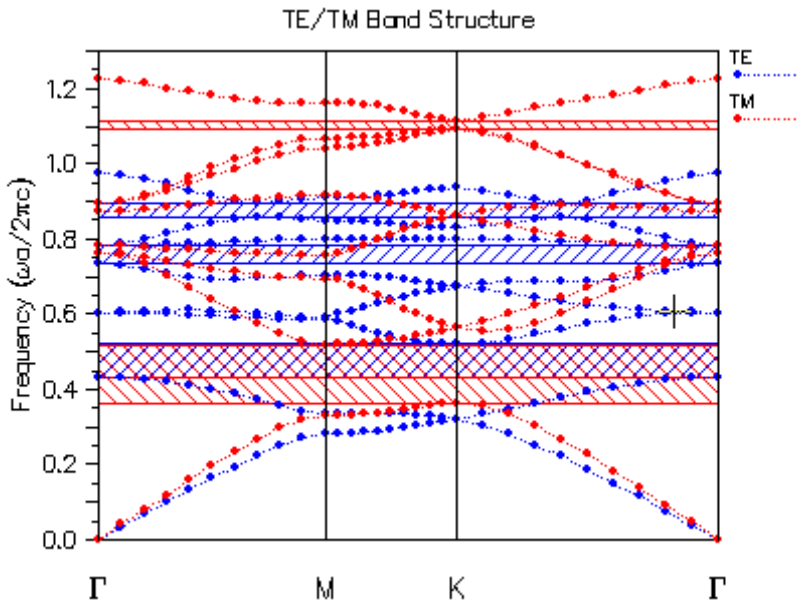
BandSOLVE تعداد زیادی از ویژگیها را علاوه بر یافتن ساختار باند پشتیبانی می کند. این ویژگیها شامل نشان دادن همه یا بعضی مودها، محاسبه مؤثر و ضرایب گروه و داشتن logs پرجزئیات پیشرفت محاسبات می شود. این ویژگیها با فشردن دکمه **Output** فعال می شود و پنجره Output باز می شود. ما این ویژگیها را در فصل بعدی بررسی می کنیم.

۶-۱-۱۱ مرحله ۱۱: شروع محاسبات

سرانجام، قبل از فشردن **ok** برای آغاز کردن محاسبات، output prefix باید مشخص شود، این پیشوند[1] برای شروع همه اسامی فایل خروجی استفاده می شود. بنابراین فایل ها از محاسبات ویژه به آسانی قابل تشخیص است. پیش فرض پیشوند **bstmp** است. این برای استفاده پیش فرض هنگام انجام محاسبات موقتی یا کاوشی برای اجتناب از پرکردن لیست داده با اعداد طولانی از فایلها مناسب است . ولی به یاد داشته باشید همیشه یک پیشوند متفاوت برای هر داده ای که می خواهید نگهدارید انتخاب کنید، به طوریکه استفاده های بعدی با همان پیشوند روی داده موجود بدون اخطار نوشته خواهد شد.

ok کنید تا ساختار باند تولید شود. در چند لحظه، خروجی شبیه زیر خواهد بود:

[1] prefix



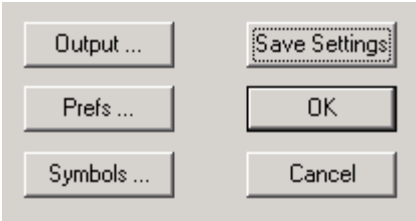
شکل ۶-۹ دیاگرام باند برای آرایه شش ضلعی2D

ما به سرعت می توانیم سه شکاف TE دو شکاف TM ویک شکاف کامل برای هر دو پلاریزاسیون را تشخیص دهیم(ناحیه هاشور خورده متقاطع).

۶-۲ تنظیمات دیگر

اکنون ما به صورت خلاصه دیگر تنظیمات را در پنجره های متعدد BandSOLVE شرح می دهیم.

بخش راست پایین در پنجره(شکل۹) شش دکمه را شامل می شود. سه دکمه عملکرد محاسبات را کنترل می کنند و سه پنجره اضافی باز می شود.



شکل ۶-۱۰ تنظیمات مختلف BandSOLVE

عملکرد دکمه ها در زیر می آید:

- Ok

چنانچه در بخش قبلی دیده شد، کلیک کردن این دکمه محاسبات ساختار باند را آغاز می کند.

- Cancel

این دکمه از پنجره بدون اجرای محاسبات BandSOLVE خارج می شود. هـر تغییـر در تنظیمـات از بین می رود.

- Save Settings

این دکمه همه تنظیمات جاری پنجره را برای symbol table ذخیره می کند. بنابراین فشـردن save settings که با **cancel** دنبال شود، تنظیمات جاری را بدون اجرای شبیه سازی خـودش ذخیـره مـی کند.(توجه کنید که تنظیمات در symbol table ذخیره می شود، ولی تغییرات به طـور همیشـگی در فایل داده مدار تا زمان فشردن دکمه save در پنجره اصلی BeamPROP استفاده شده ذخیـره نمـی شود.)

- Output…

این دکمه پنجره اصلی output را باز می کند. این پنجره شامل مجموعه صفحات اضافه شده کنتـرل مود خروجی، واحدهای فرکانس، اندازه گیری و ورودیها است. استفاده آن در فصل ۶ بحث شده است.

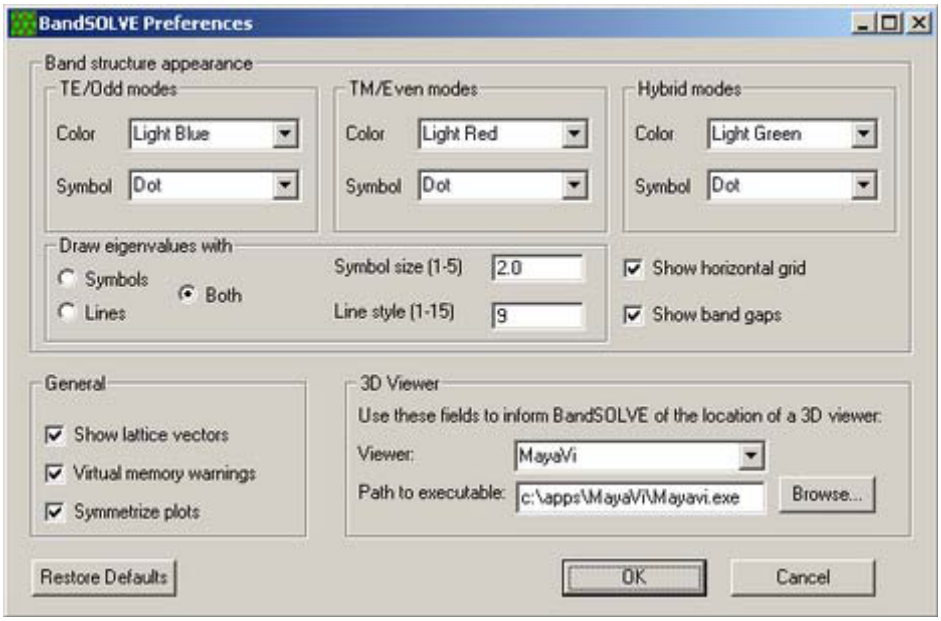
- Symbols…

این دکمه پنجره symbol table استاندارد را باز می کند.

- Prefs…

این دکمه پنجره نمونه کنترل ظاهر شکلهای سـاختار بانـد و جنبـه هـای دیگـر متعـدد رفتـار Band SOLVE را باز می کند. این ها اولویت های کلی است که به همه محاسبات بعدی در هـر فایـل داده مدار اعمال می شود. فشردن **ok** برای این پنجره فایل روی دیسک برای ذخیره آنها برای همیشـه بـه روز میکند.

پنجره مثل این است:



شکل ۶-۱۱ Global preferences for BandSOLVE

ردیف بالای صفحه رنگها و نمادها را با مقادیر ویژه و باندهای کشیده شده در نقشه های ساختار باند را تنظیم می کند. هنگام تغییر پیش فرض ها، برای حفظ ترکیب مغایر رنگ زمینه و طرح برای پلاریزاسیون ها سعی کنید.

- Draw eigenvalues with symbols/ Lines/Both

این گزینه تعیین می شود اگر مقادیر ویژه در ساختارهای باند با خطوط و/ یا به صورت مجزا با نقاط کوچک به هم متصل باشند. برای محاسبات با هزاران مقدار ویژه، کشیدن همه نمادها زمان قابل توجهی را صرف می کند و غیرفعال کردن symbol drawing مفید است.

- Show horizontal grid

هنگام فعال بودن، مختصات افقی در ساختار باند برای کمک به تشخیص مقادیر فرکانس کشیده می شود.

- Show band gaps

جستجو و نشان دادن شکاف های باند با علامت زدن هاشور خورده ها روی نقشه های ساختار باند.

- Symbol size

اندازه مقیاس همه نمادها در نقشه های خروجی(فایل WinPLOT help را ببینید.)

- Line style

Line style برای کشیدن باندها(فایل win plot help را ببینید.)

گزینه ها در جدول General معانی زیر را دارد:

- Show la tice vectors

مرزهای سلول های واحد را هنگام کشیدن حوزه ها نشان می دهد.

- Virtual memory warnings

بوسیله پیش فرض BandSOLVE یک اخطار را صادر می کند، اگر یک محاسبه نیاز به استفاده از حافظه مجازی داشته باشد. کاربر می تواند شبیه سازی را انجام دهد یا رها کند. این مفید است چنانچه کامپیوتر پاسخدهی را از دست بدهد و شبیه سازی به کندی اجرا شود اگر حافظه مجازی استفاده شود.

- Symmetrize plots

با این گزینه فعال شده، BandSOLVE گزینه های زیادی را در طول لبه های تصویر نمایش داده شده اضافه می کند برای اینکه شکلها به طور تقارن کامل ظاهر شوند. با این گزینه فعال شده، تصویر بدقت مجموعه واقعی از نقاط واقع در محاسبات را نشان می دهد.

3D Viewer برای تنظیم موقعیت برنامه 3Dviewer به کار می رود. این میدان باید در بخش Informing BandSOLVE از نصب MayaVi شما تنظیم شود.

فصل ۷ استفاده BandSOLVE II:

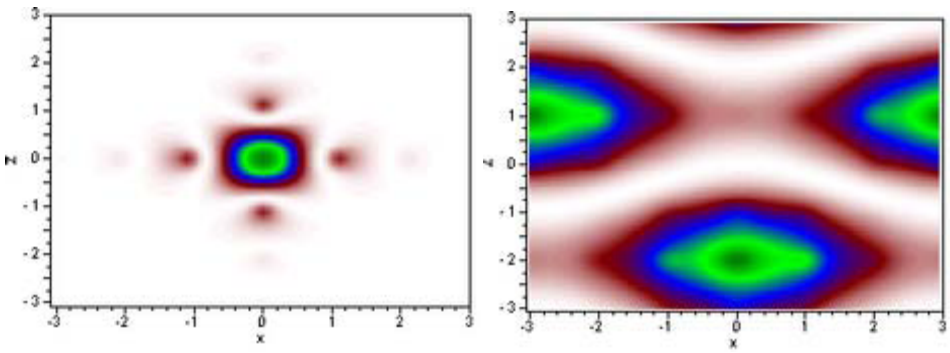
تحلیل و کنترل خروجی

این فصل ابزارهای BandSOLVE را برای تحلیل ساختارهای باند و مودهای کریستال فوتونی معرفی می کند. ابزارها به دو گروه تقسیم می شوند: تولید و نمایش مود شکلها و اندازه گیری خصوصیات مدل از قبیل ضریب شکست مؤثر، ضریب شکست گروه و حوزه های مود. اینجا ما تنظیمات لازم را برای خروجی مد مؤثر و اندازه گیری ها را شرح می دهیم. همچنین ما تعدادی از تنظیمات را برای میزان سازی ظریف رفتار شبیه سازی و نمایش نتایج را بحث می کنیم.

۷-۱ ساخت و نمایش پروفایل های مود

در محاسبات ساختارهای باند، BandSOLVE ذاتاً مود شکل سه بعدی را برای هر مود پیدا شده محاسبه می کند. تعدادی دلایل وجود دارد که ما می خواهیم انتشار سه بعدی مود را ببینیم. برای مثال، توزیع انرژی در شکاف های باند می تواند به ما در فهمیدن منبع شکاف باند و چگونگی بهینه سازی پهنای آن کمک کند.

تمایل به دیدن شکل حالت معیوب عادی است، و در برخی موارد ما ممکن است بخواهیم میدان مدل را با ابزار شبیه سازی دیگری نظیر BeamPROP یا FullWAVE اجرا کنیم. مودهای خروجی دو مثال در شکل ۱ برای مود بلاخ بسط داده شده و یک حالت معیوب متمرکز شده نشان داده شده است.



شکل ۷-۱

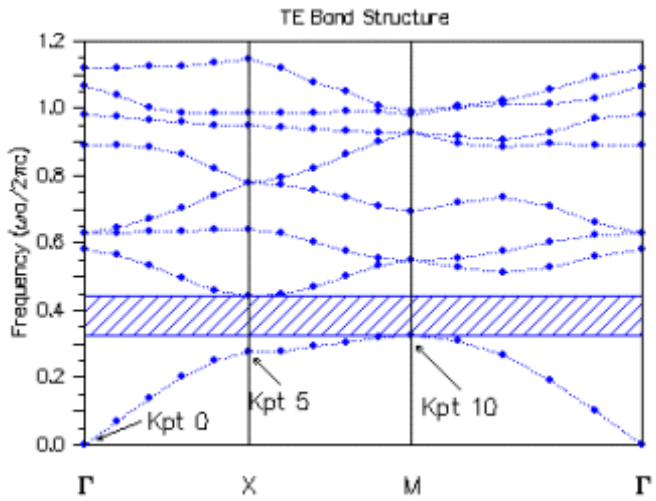
اگرچه، ذخیره سازی هر شکل مقدار زیادی و از فضای دیسک را استفاده خواهد کرد و ضروری نیست، از آنجایی که، به طور کلی ما فقط نیاز داریم که مجموعه کوچکی از مودها را امتحان کنیم، و اغلب هیچ کدام را در کل. بنابراین، خروجی داده شکل مود باید به وضوح در BandSOLVE فعال شده باشد از طریق پنجره ای که بخش قابل تغییر حالت های مطلوب را می پذیرد. ما ابتدا چگونگی تعیین کردن مودهای مطلوب را نشان می دهیم و سپس درباره چگونگی اینکه مودها براحتی دیده می شود بحث می کنیم.

۷-۱-۱ تولید ساختار باند

در این بخش ما مثال شبکه مستطیلی 2D که ما در فصل ۵ استفاده کردیم را به کار خواهیم برد.

ابزار RSoft CAD را باز کنید و فایل <rsoft_dir>/Exampel/ BandSOLVE/pbgrect.ind را اجرا کنید.

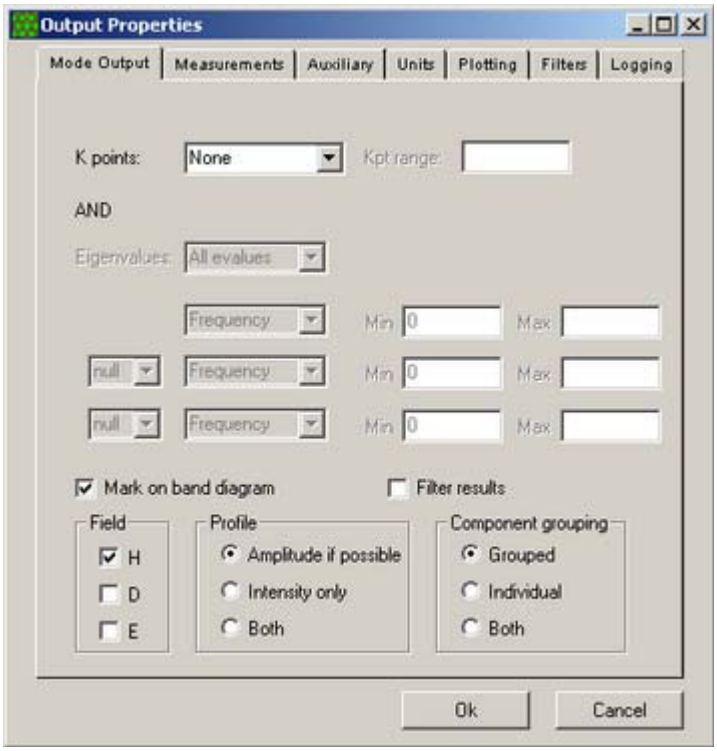
استفاده روش توضیح داده شده در فصل گذشته، دکمه چراغ ترافیک را برای باز کردن پنجره Band SOLVE فشار دهید. سپس پلاریزاسیون TE را انتخاب کنید و ساختار باند را تولید کنید. چنانچه بقیه پیش فرض ها خوب است، بعد از انتخاب پلاریزاسیون، شما به فشار دادن **ok** به سادگی نیاز دارید. اگر شما با این روش راحت نیستید، لطفاً فصل ۸ را قبل از ادامه کار مرور کنید. ساختار باند باید شبیه زیر باشد:



شکل۷-۲ ساختار باند شبکه مکعبی 2D

۷-۱-۲ انتخاب مودها

اکنون به پنجره BandSOLVE بازگردید و دکمه **Output** را فشار دهید. پنجره مثل شکل ۳ باز می شود. کلیدهای مختلف در این پنجره تعدادی از ویژگی های مربوط به خروجی را تنظیم می کند. اولین کلید قسمت اصلی است که مربوط به نمایش mode profiles می باشد.



شکل ۷-۳ پنجره تنظیم خروجی مود

این پنجره به عنوان مجموعه از قوانین طرح شده است.با استفاده این موقعیتها میتوانیم مجموعه مفیدی از مودها را مجزا کنیم که انها دقیقا" خروجی می باشد.این از لزوم بررسی کل دوازده یا حتی صدها مود برای یافتن مورد مناسب اجتناب می کند.مثلا" مود تشدید عیب متمرکز شده در وسط مودهای بسط داده شده زیاد.

گزینه تنظیمات به دو بخش تقسیم شده است برای انتخاب هر دو نقاط **k**-path و مقادیر ویژه مجزا برای مودهایی که باید تولید شود.

شماره گذاری مودها

به منظور مراجعه به مودهای قرار دادی نیاز به یک سیستم برچسب گذاری داریم .در BandSOLVE به هر مقدار **k** با بر چسب عدد صحیح از چپ تا راست در ساختار باند با شروع از صفر معین شده

است. به عنوان مثال، ساختار باند در شکل ۲ اعداد معین شده برای نقاط متقارن را بـا تقسـیمات **k** 5 در هر بخش نشان می دهد.به طور مشابه، مقادیر ویژه (باندها) از صفربا فرکانس افزایشـی شـماره دار شده است.

انتخاب k-path points

مرحله اول انتخاب اینکه k-path points می تواند مود خروجی را تولید کند می باشد.این پارامتر با **K points** برچسب دار شده است که دارای گزینه های زیر می باشد:

- **None** - هیچ کدام از مودها در کل خروجی نیست. این تنظیمات پیش فرض است که همـه خروجی ها را نشان می دهد.
- **All points** - مودها برای هر مقدار **k** در طول **k**-path خروجی است.
- **Symmetry points** - مودها فقط در نقاط متقارن در ناحیـه بریلیـون خروجـی اسـت. ایـن مفید است چون ما به مودها در لبه های باند و نقاط Γ علاقمند هستیم.
- **Range**– مودها درهمه مقادیر **k** که در میدان با **Kpt range** علامت دار شده است خروجی می باشد. این محدوده، فهرستی از اعداد صحیح و محدوده های صـحیح جـدا شـده بـا کامـا است، نقاط روی ساختار باند از چپ به راست شماره گذاری شده اند. مثالهایی از مقادیر قابـل قبول عبارتند از:
- 0 اولین مقدار از **k**
- 7,2,0 سه مقدار از **k**
- 6-0 همه مقادیر از 0 تا مقدار 6 از **k**
- 6 همه مقادیر از 6 تا به بالا
- 17,13,11-9,7,-5 ترکیبی از محدوده ها و مقادیر منفرد.

انتخاب eigenvalues

بخش دوم از پنجره تعیین می کند که مقادیر ویژه بخصوص برای هر **k**-points انتخاب شده خروجی است. توجه کنید که همان قوانین مقادیر ویژه برای **k**-points به کار می رود.

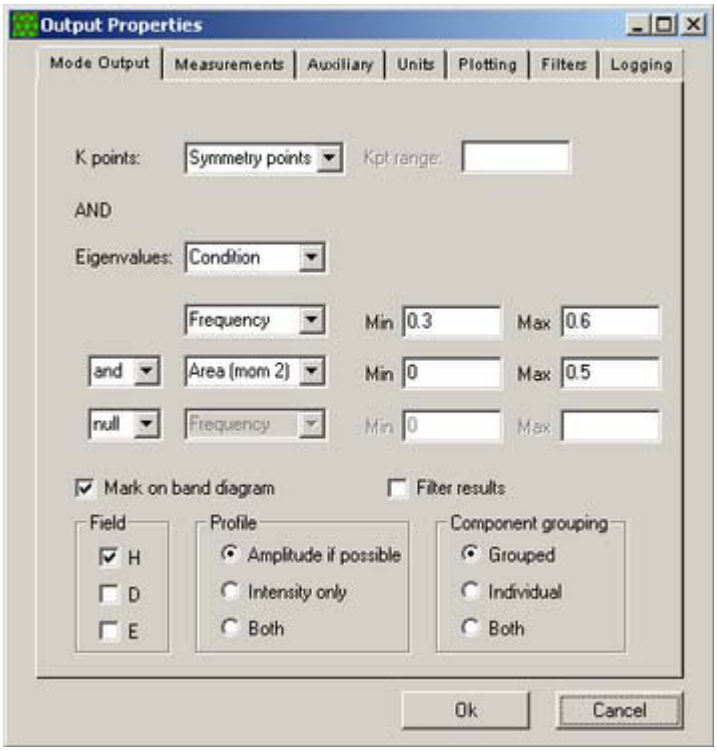
ساده ترین مورد و پیش فرض با **Eigen values**=All evalues تنظیم شده است. بـا ایـن تنظیمـات همه مقادیر ویژه برای یک مقدار فعال از **k** خروجی است.

تنظیم بیشتر با **Eigen values**=Condition ممکن است. این تنظیمات مجموعه ای از کنترل ها را که یک مجموعه از شرایط که یک مد باید در خروجی ارضا شود را تعیین می کند. هر سطر یک وضعیت را تنظیم می کند و استفاده منوها در سمت چپ می تواند با عملگرهای **and** و **or** بولی ترکیب شود.

اگر این کار را قبلاً انجام نداده اید، **Eigen values**=Condition تنظیم کنید. و منو را در خط اول امتحان کنید. این فهرست دارای مقادیر Area(mom2), Area, Range, Frequency است که به صورت زیر عمل می کند:

- Range- این در همان طریقه تنظیمات Range برای **k**-points کار می کند. لیستمی از اعداد صحیح و مقادیر صحیح که با کاما جدا شده باندهای مطلوب را که از صفر تا پایین ترین باند شمرده می شود را انتخاب می کند.
- Frequency- مقادیر وارد شده در حوزه های **Min** و **Max** محدوده معتبر از فرکانس ها را تعیین می کند در مود باید بشکند اگر خروجی باشد. برای مثال، برای تلاش برای مجزا کردن مود معیوب داخل شکاف باند، ما باید **Min** و **Max** را برای فرکانس های لبه های باند تنظیم کنیم و فقط حالتهای معیوب خروجی می شود. مقادیر فرکانس همیشه در frequency units شمرده می شود که در نوار **Units** در پنجره output تنظیم می شود.
- Area(mom2)Area- حوزه های **Min** و **Max** محدوده های فضای سه بعدی یا ظرفیت مود را تعیین می کند. دو مشخصه فضای مود بعداً در این فصل در بخش اندازه گیری مود بحث می شود. این گزینه همچنین برای مجزا کردن حالت های تشدید شده یا مودهای مرزی مفید است از این رو این قبیل حالت ها معمولاً دارای خصوصیات حوزه است که بیشتر از انتشار مبسوط حالتهای بلاخ شبکه محدود شده است.

برای ترکیب دو وضعیت، ما به سادگی **and** یا **or** را در جدول در قسمت چپ خط دوم انتخاب می کنیم و وضعیت اضافه شده را تعیین می کنیم، ما می توانیم حالت frequency را برای پذیرفتن تنها مودهای درون شکاف باند مشخص می کنیم، و حالت مود area برای ضمانت مود محدود می شود. در این مورد پنجره باید شبیه شکل ۴ شود.



شکل ۷-۴ پنجره خروجی مود برای جداسازی حالت مرزی

در عمل که سه وضعیت مورد نیاز است، ما به تعیین اولویت در ترکیب عملگرهـای بـولی نیـاز داریـم. حالت کامل به صورت زیر تعریف می شود:

حالت ۳ عملگر بولی ۳ (حالت۲ عملگر بولی ۲ حالت ۱) = جواب

این انعطاف پذیری برای هرعملی کافیست.

انتخاب فرمت مد

سه جدول در پایین پنجـره تعیـین مـی کنـد کـه کـدام یـک از میـدانهای الکترومغناطیسـی تولیـد شود.(**D،H** یا **E**) و فرمت در آنها ذخیره می شود. جدول **Profile** انتخاب می شود اگر میدانها باید به صورت دامنه حقیقی یا شکلهای شدت رسم شود.(شکیل دهنده فقط در موارد ویژه امکان پذیر است بخش Rostrictions را در زیر ببینید.) جدول **Component groping** اگر مدها بـه صـورت ترکیـب نمایش داده شود انتخاب می شود- (برای مثال longitudinal/ transverse بـرای2D)- یـا بـه عنـوان individual components.

نکات ساختار باند

به صورت پیش فرض، BandSOLVE همه مودهای ذخیره شده در نمایش ساختار باند را با یک جفت اعداد مشخص کننده **k**-point و مقادیر ویژه علامت گذاری می کند. این نکات با عدم انتخاب Mark on band diagram غیرفعال می شود.

مدل خروجی و اسامی فایل

BandSOLVE مـی توانـد مـدها را در شـکل هـای مختلـف نمـایش دهـد. امکانـات شـامل میـدان الکترومغناطیسی (**H**،**D** یا **E**)، intensity در مقابل amplitude و نمایش اجزاء میـدانهای مختلـف بـه صورت individually یا together است.

تذکر

مدها در فایل های جداگانه ذخیره می شوند، و اسم فایل خصوصیات و فرمت مد را به صـورت رمـزی درمی آورد. اسم فایل صورت کلی زیر را می گیرد.

[HDE][xyzt]_[ai]_k_<knum>_m_<modenum>.<suffix>><prefix

اینجا قلاب های مربعی یک گزینه را مشخص می کنند و قلاب های گوشه ای یـک عـدد صـحیح یـا رشته را مشخص می کنند. هر گزینه معانی زیر را دارد.

- <prefix>

پیشوند فایل خروجی استاندارد از صفحه BandSOLVE اصلی.

- [HDE]

نوع میدان: مغناطیسی(**H**)، جابجایی الکتریکی(**D**) یا میدان الکتریکی(**E**).

- [xyzt_]

اجزا یا ترکیب اجزا. این می تواند میدانهای منفرد (xyz)، مؤلفه های متقاطع(t)، یا کل میدان (_).

- [ai]

دامنه(a) یا شدت(i) نمودار را مشخص می کند.

- <knum>

تعداد نقاط **k**-path (شروع از صفر)

- <modenum>

تعداد باند مود(شروع از صفر)

- <suffix>

فایلهای Winplot (.pcs) یا 3D viewer (.vtk) را مشخص می کند.

برای مثال:

- Bstmp_Hx_a_k_0_m_5.pcs

فایل winplot از مؤلفه x از میدان **H**، به عنوان دامنه ، برای مد 5 در **k**-point 0 بیان شده است.

- Bstmp_Ht_i_k_5_m_0.vtk

فایل 3D از مولفه میدان H ،به عنوان شدت ، برای مود 0 در k-point 5 بیان شده است.

- Bstmp_D_i_k_0_m_0.vtk

فایل 3D از شدت از میدان **D** کامل، برای مد 0 در **k**-point 0 .

محدودیت ها

هر ترکیبی از نمایش میدان همیشه ممکن نیست. بخصوص، انتخاب بین نمایش amplitude و intensity تا حدی پیچیده است. میدانها برای بیشتر مدها در ساختار باند می تواند فقط به عنوان اعداد مختلط بیان شوند. اگرچه در مسائل 2D برای مقادیر **k**، مخصوصاً آنهایی که 2**k** با یک بردار شبکه هم پاسخ منطبق است، ما می توانیم فاز نوری را انتخاب کنیم چنانکه میدانها می تواند به عنوان یک کمیت حقیقی بیان شود. برای شبکه های مکعبی، این یعنی مودها در هر نقطه متقارن می تواند به عنوان کمیتهای حقیقی بیان شود. برای شبکه های غیرمکعبی، معمولاً فقط برای برخی نقاط متقارن درست است. البته همیشه برای نقاط Γ درست است. به صورت پیش فرض، Band SOLVE نقاط k را آشکار می کند که مودهای حقیقی ، و خروجی ها که مودهای آنها به عنوان مؤلفه های حقیقی با مقادیر مثبت و منفی را پشتیبانی می کند. برای همه مدهای دیگر، BandSOLVE شدت مودها را رسم می کند. این رفتار می تواند با استفاده دکمه های جدول profile از پنجره در شکل ۳ تغییر داده شود. انتخاب Intensity Only موجب می شود همه مدها به صورت شدت رسم شود. تنظیم Both همه مودها به عنوان شدت رسم شود و خروجی حقیقی برای آن مودها برای آنها که امکان پذیر است اضافه شود.

فرمت نمایش مود همچنین به ابعاد مسأله بستگی دارد. برای مسائل 2D میدان in-plane یا میدان transverse به عنوان میدان برداری رسم می شود اگر حقیقی باشد، یا یک طرحی از شدت رسم می شود اگر کاملاً حقیقی نباشد. میدان طولی به صورت جداگانه به عنوان معنی تراز دامنه یا شدت رسم می شود.

وجود مودهای تبهگن می تواند گاهی اوقات تولید میدانهای خروجی حقیقی را پیچیده کند. هنگامی که دو میدان دارای مقادیر ویژه خیلی مشابه باشند و تلرانس عددی برای تشخیص مقادیر ویژه خیلی بزرگ است، ممکن است کمی آمیختگی بین مودها وجود داشته باشد. آمیختگی تأثیر ناچیزی روی مقادیر ویژه دارد ولی به صورت قابل توجه مودها را تغییر می دهد. این به جداسازی نادرست از قسمت های حقیقی و موهومی منجر می شود و مود نمایش داده شده درست نیست. این می تواند با

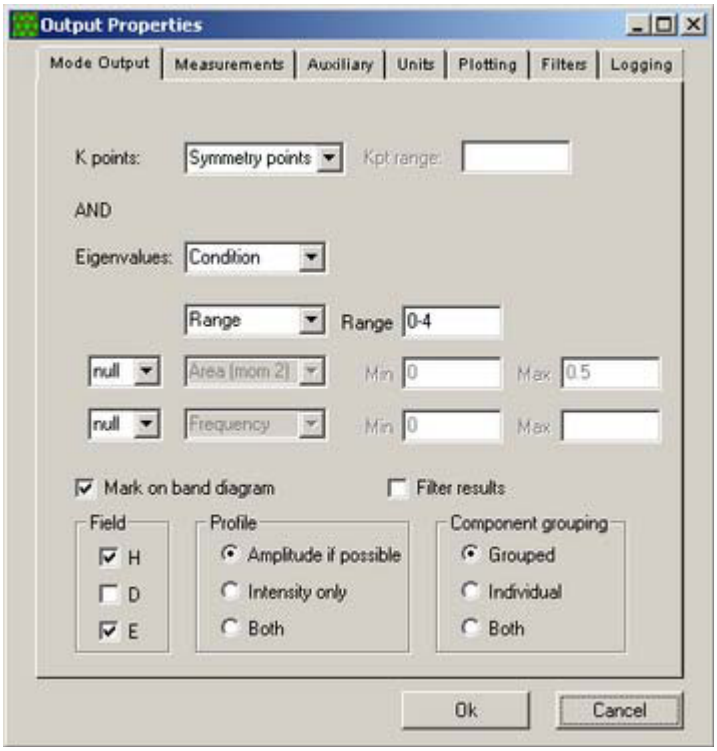
امتحان مقدار Image Ratio در شکل خروجی بررسی شود. اگر ایـن مقـدار بـزرگ تـر از تقریبـاً 1% باشد، استفاده شکل های شدت بهتر است.

چنانکه در بالا نشان داده شد، همچنین نمایش مؤلفه های میدان به صورت جداگانه یا در گروه هـای دهدهی امکان پذیر است. برای مسائل 2D، پیش فرض میدانها را به عنوان عرضی(بـردار) و میـدانهای طولی(عددی) نمایش می دهد، در صورتیکه بـرای مسـائل 3D، پـیش فـرض شـدت کامـل از میـدان $\left|\mathbf{H}\right|^2 = \left|H_x\right|^2 + \left|H_y\right|^2 + \left|H_z\right|^2$ را نشان می دهد. مولفه ها به صورت جداگانه نمایش داده می شود اگر دکمه Individual در جدول Component Grouping انتخاب شود. هر دو فرم از خروجی بـا انتخـاب Both فعال می شود.

نمایش مودها

ما اکنون واقعاً برخی مودها را می سازیم و می بینیم.

- هنوز فایل **pbgrect.ind** استفاده کنید. پنجره خروجی BandSOLVE باز کنید و کنتـرل را برای ساختن مودها برای همه نقاط متقارن **K**-path و برای همه مقادیر ویژه از بانـدهای 0-4 سـاختن میـدانهای **H** و **D** تنظـیم کنیـد. تنظیمـات داخـل جـدول Mode format و Component grouping بدون تغییر است برای تولید شـکلهای حقیقـی از مـدهای عرضـی/ طولی. تنظیمات درست برای رسیدن بـه ایـن منظـور در شـکل ۵ نشـان داده شـده اسـت.(BandSOLVEهر مقادیر وضـعیت را در جـدولهای غیرفعـال را نادیـده مـی گیـرد بنـابراین اهمیتی ندارد اگر میدانهای غیرفعال کمی تفاوت داشته باشند.)



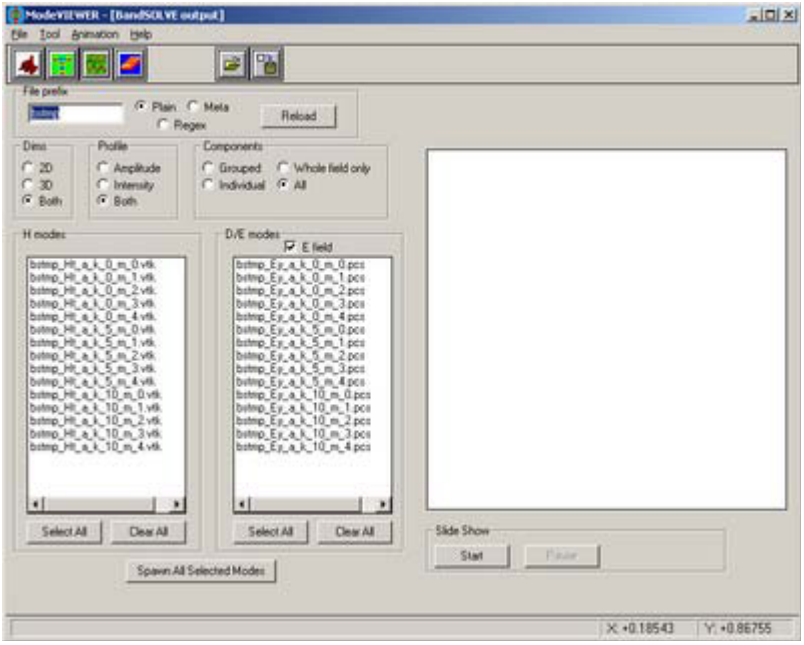
شکل ۷-۵ تظیمات مود خروجی مثال

- برای بستن پنجره **Ok** کنید و در پنجره BandSOLVE اصلی، **Number of bands**=8 تنظیم کنید، و برای اجرای محاسبات BandSOLVE **ok** کنید. نتیجه ساختار باند شامل تعدادی از جفت اعداد صحیح مشخص کننده مودها است که در دیسک ذخیره می شود.

Mode VIEWER

انتخاب حالتها برای کنترل تعداد مودهای خروجی، روشن است از تعداد مودهای علامت دار شده در شکل ساختار باند، که اجرای BandSOLVE نمونه می تواند تعداد بسیاری از فایل های مود خروجی را تولید کند. طبقه بندی کل این مودها با فایل استاندارد اکسپلور خسته کننده است، بنابراین BandSOLVE با برنامه گرافیکی برای شروع نمایش مود جابجا می کندکه Mode VIEWER نامیده می شود. تحت ویندوز، به صورت قابل اجرا modeviewer.exe نامیده شده و در C:\RSoft\bindirectoryاست. و تحت یونیکس /usr/local/rsoft/bin/modeviewer است.

Mode VIEWER را با انتخاب View/Launch ModeVIEWER در منوی پنجره شبیه سازی Band SOLVE یا با فشردن Ctrl-M در پنجره BandSOLVE کنید. ModeVIEWER شامل یک پنجره است که در شکل ۶ نشان داده شده است.



شکل ۷-۶ پنجره Mode VIEWER

برای نمایش مودها ما فقط در BandSOLVE تولید می کنیم، مراحل زیر را انجام دهید:

۱- مسیر جاری را به مسیری که در آن شما محاسبات BandSOLVE را انجام می دهید تنظیم می کنید. شما می توانید این را با فشردن آیکون open file یا انتخاب File/change directory و انتخاب هر فایل در مسیر انتخاب شده انجام دهید. توجه کنید اگر شما ModeVIEWER را از پنجره شبیه سازی باز کنید، تنظیمات درست است.

۲- **File Prefix** را به پیشوند خروجی استفاده شده در Band SOLVE تنظیم کنید. احتمالاً، مقدار پیش فرض **bstmp** است. دوباره، اگر شما ModeVIEWER را از پنجره شبیه سازی باز کنید، پیشوند درست است. کلید ثبت را برای جدید کردن دو لیست H modes و D/E modes فشار دهید. هر لیست باید شامل ۱۵ داده باشد چنانچه در شکل ۶ نشان داده شده است.

۳- سه جدول عنوان دار شده، **Dims**، **Profile** و **Components** برای فیلتر اعضای لیست ها برای مجزا کردن مدهای مورد علاقه استفاده می شود. امتحان کنید با ترکیب های مختلف از این دکمه ها و توجه کنید که چگونه محتوای لیست ها تغییر می کند. هنگامی که تمام شد، همه جدولها را برای نمایش همه مدها به **Both** تنظیم کنید.

۴- هر عضو از لیست ها را با اسم فایلی که به pcs. ختم شده است انتخاب کنید که یک فایل Win PLOT را نشان می دهد.(در این مورد، میدانهای **D** به **pcs**. ختم می شوند و همه حوزه های **H** به **vtk**. مبنی بر یک فایل MayaVi ختم می شود.) شکل برای آن مود در نقشه سمت راست نشان داده می شود.

۵- همچنین انتخاب مدهای چندگانه به صورت همزمان و نمایش همه آنها در پنجره WinPLOT یا MayaVi تولید شده توسط ModeVIEWER امکان پذیر است. موس را برای انتخاب یک یا چند فایل در لیست های مود استفاده کنید. انتخاب های چندگانه می تواند با نگه داشتن Ctrl یا کلیدهای shift ساخته شود. انتخاب همچنین می تواند با دکمه های **SelectAll** و **ClearAll** کنترل شود.

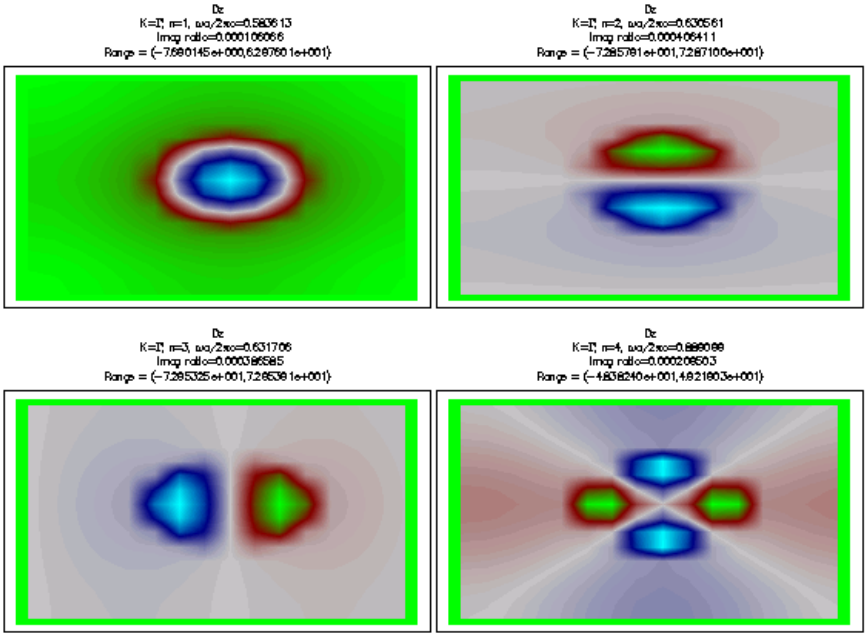
۶- دکمه **Spawn All Selected Modes** برای نمایش همه مدهای انتخاب شده فشار دهید. فایل های ختم شده به pcs. به عنوان شکلهای برجسته 2D در WinPLOT نمایش داده می شود. فایل های ختم شده به vtk. میدان های برداری یا شکلهای شدت 3D است و فقط نمایش داده می شود اگر شما MayaVi viewer را نصب کرده باشید.(فصل ۴ را ببینید).

توجه: از آنجایی که MayaVi viewer می تواند برای شروع زمانی را بگیرد برای انتخاب نکردن فایل های زیاد vtk. برای نمایش شبیه سازی ایده خوبی است. اگر کامپیوتر کند شود یا جوابگو نباشد، برخی از پنجره های MayaVi را ببندید. این مشکلی برای فایل های pcs. نیست.

در مثال بالا، ما یک مسأله 2D با پلاریزاسیون TE را حل کردیم. برای پلاریزاسیون TE میدان الکتریکی در جهت y خارج صفحه جهت دار شده است، و میدان مغناطیسی در صفحه است.

بنابراین در لیست مودها در ModeVIEWER، همه مودهای میدان مغناطیسی دارای مولفه پیشوندی **Ht** که مشخص کننده میدان عرضی است می باشند، در صورتیکه جابجایی مودهای میدان دارای پیشوند **Dy** مشخص کننده میدان طولی است می باشند. علاوه بر این، میدان **H** عرضی از دو مؤلفه تشکیل شده است، آن به عنوان میدان برداری بیان شده هنگامی که میدان **D** طولی نشان داده شده به عنوان شکل برجسته در WinPLOT. توجه کنید که ما مودها را فقط در نقاط متقارن درخواست می کنیم، اعدادی که **_k** را در اسم فایل دنبال می کند بر نقاط متقارن منطبق است با انتخاب پیش فرض تقسیم بندی ۵ در هر بخش از **k**-path.

شکل ۷ انتخابی از میدانهای **D** را در نقطه Γ نشان می دهد.

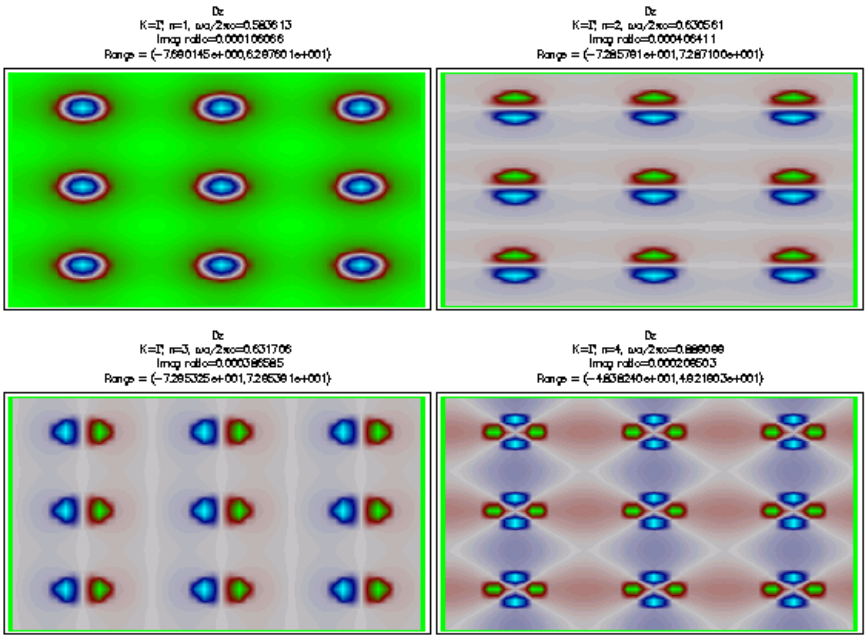


شکل ۷-۷ میدانهای D برای شبکه 2D در نقاط Γ

به صورت پیش فرض، میدانها در یک سلول واحد نشان داده می شود. اگرچه، این شکلها می تواند بیشتر آشکار شوند. اگر چندین سلول واحد نشان داده شود. این با انتخاب Plotting در بالای پنجره خروجی بدست می آید و تنظیم حوزه های **Lattice repetitions** به اعداد صحیح بیشتر از ۱ بدست می آید. هر میدان مربوط به تعداد تکرار در هر جهت در هر بردار شبکه است. مقدار قابل قبول معمولاً 3 است. بعد از این تغییر، به محاسبات BandSOLVE بازگردید، سپس دوباره مودها را در ModeVIEWER اجرا کنید و دوباره برخی مودها را نشان دهید. آنها در شکل ۸ نشان داده شده است.

آن یک تمرین جالب برای مقایسه مودها از همان باند در نقاط متقارن مختلف یا، باندهای مختلف در همان نقاط متقارن است. برای مثال، مودها را در باند ۱ در هر سه نقطه متقارن امتحان کنید و کوشش کنید و راهی را که فاز از یک سلول واحد به سلول واحد دیگر تغییر می کند را بفهمید.

ModeVIEWER همچنین از تنوع ویژگی های تغییر تصویر توانا است، شامل صدور فرمت های تصویر متفاوت و تولید انیمیشن برای نمایش در صفحات وب یا ارائه می باشد.



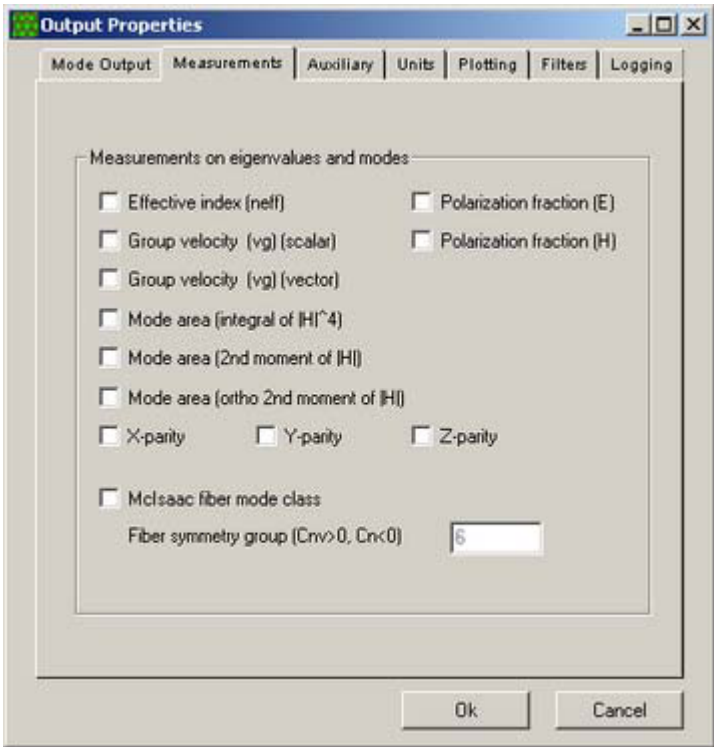
شکل ۷-۸ مودهای 2D با تکرار ۳

۷-۲ ویژگی های دیگر پنجره خروجی

به خوبی کنترل تولید شکل های مود، پنجره خروجی شامل جدولهایی برای تغییر جنبه های زیادی از رفتار BandSOLVE است. اکنون ما این گزینه ها را جدول به جدول بررسی می کنیم.

۷-۲-۱ Measurements and diagnostics

به علاوه برای تولید خروجی مودها، BandSOLVE می تواند تعدادی از Measurements از خصوصیات مود ، شامل ضریب مؤثر، ضریب گروه و فضای مود را اجرا کند. اینها توسط جدول **Measurements** نشان داده شده در شکل ۹ کنترل می شود.



شکل ۷-۹ جدول Measurements از پنجره خروجی

هنگامی که فعال شد، اندازه گیری ها برای هر مود در ساختار باند انجام می شود، خواه آن مود ذخیره شده باشد یا نه. نتایج برای هر اندازه گیری در یک فایل جداگانه ذخیره می شود در فرمت یکسان به عنوان داده مقدار ویژه که ساختار باند را نشان می دهد. به منظور محدود کردن تعداد فایلهای نوشته شده، BandSOLVE به صورت جاری فایلهای دستور winplot را برای نمایش این داده نمی سازد. نسخه های بعدی BandSOLVE شامل توانایی های انعطاف پذیر برای آزمایش همه نمونه های داده اندازه گیری خواهد بود.

اندازه گیری های خصوصیات مود با استفاده جدول Measurements از پنجره خروجی Band SOLVE فعال می شود.

اندازه گیری های در دسترس و تعاریف آنها در زیر آمده است:

- Effective index

برای هر مد این فقط نسبت قدر مطلق بردار **k** و فرکانس مود است.

$$n_{eff} = |\mathbf{k}| / \omega$$

فایل های خروجی <pre fix>_neff_TE.dat ,<prefix>_neff.dat <prefix>_neff_TM.dat , و غیره نامیده می شود.

- Group velocity

BandSOLVE می تواند سرعت گروه را برای هر مود استفاده کننده یک نتیجه معروف مثل قضیه هلمن- فینمن[1] محاسبه کند که شرح های زیرین را توضیح می دهد:

اگر برای یک عملگر هرمیشن $\hat{\theta}k$ پارامتری شده توسط کمیت برداری پیوسته **k**، ما راه حل های ویژه داریم:

$$\hat{\theta}_k v_k = \lambda_k v_k \ ,$$

جایی که توابع ویژه vk به واحد نرمالیزه شده است، سپس گرادیان نسبت به k ساده است.

$$\frac{\partial}{\partial k}\left(v_k^* \theta_k v_k\right) = v_k^* \frac{\partial \theta_k}{\partial k} v_k$$

بنابراین، از این رو برای معادله بردار هلم هولتز، همیلتنین ارضا می کند

$$v_k^* H_k v_k = \frac{\omega^2}{c^2} \ ,$$

ما می توانیم از هر طرف مشتق بگیریم برای بدست آوردن

$$\frac{2\omega}{c^2}\frac{\partial \omega}{\partial k} = v_k^* \frac{\partial H_k}{\partial k} v_k \ ,$$

که بدست می آید

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{c^2}{2\omega}\left(v_k^* \frac{\partial H_k}{\partial k} v_k\right)$$

سرعت گروه به عنوان هر دو دامنه عددی به خوبی کمیت برداری در مختصات کارتزین می تواند ثبت شود.

- Mode area

به صورت جاری BandSOLVE اندازه های متعددی از مود را پشتیبانی می کند. عبارت Mode area بیشتر به صورت بی قاعده استفاده می شود. اینها واقعاً مجموعه ای از کمیت های طراحی شده برای اندازه گیری درجه تمرکز مود است. تعاریف آنها در زیر آمده است:

- Mode area(Integral of |**H**|^4)

این تعریف یک بسط بردار از تعریف استاندارد استفاده شده در شکل های م,د از موجبرهای نوری است:

[1] Heymann-feynmann Theorem

$$A^{(1)} = \frac{\left(\sum_{j=x,y,z} \left| H_j \right|^2 \right)^2}{\sum_{j=x,y,z} \left| H_j \right|^4} V_{unit\ cell}$$

Mode area(2nd moment of|**H**|)

برای هر مؤلفه از میدان، ما مقدار امید از کمیت α را تعریف می کنیم

$$\langle \alpha \rangle_j = \int_{cellvol} \mathrm{d}^3\mathrm{x}\, |H_j|^2\, \alpha$$

پس mode area برای هر مؤلفه تعریف می شود به عنوان متوسط میدان بردار موقعیت

$$A_j = \langle x\ \ x \rangle_j - \langle x \rangle_j^2$$

در نهایت، فضای کلی تعریف می شود:

$$A^{(2)} = \sqrt{f_j A_j}$$

که f_j بخشی از انرژی میدان در مولفه j است. توجه کنید که این کمیت در حقیقت ابعاد طولی است، چه محاسبات در یک، دو یا سه بعد انجام گیرد.

برای بیشتر موارد تعریف دومین گشتاور بیشتر مناسب و معتبر است. تعریف تا حدی اختیاری است و باید برای تشخیص مودهای مرزی از حالتهای تابشی به کار برده شود. مقادیر mode area مستقیماً قابل انتقال به تعاریف قراردادی مودهای فیبر یا موجبر نیست.

سومین روش همچنین وجود دارد:

- Mode area(ortho 2nd moment of |**H**|)

این تعریف مثل تعریف 2nd moment است بجز اینکه جابجایی بردار x از میدان برخلاف بردار موج **k** قبل از انتگرال گیری کشیده می شود.

$$A_j = \langle \mathrm{x}'\ \mathrm{x}' \rangle_j - \langle \mathrm{x}' \rangle_j^2$$

با

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} - (\mathbf{x}\ \hat{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{k}}$$

این تعریف یعنی پذیرفتن مقادیر معقول برای محاسبه شدن برای پهنای مود از موجبرهای PBG. برای این قبیل مودها، فضای مود به اندازه استقرار آن حول مرکز موجبر که در طول بردار موج نقطه گذاری شده است جالب توجه نیست.

توجه: احتمالاً مدل های در دسترس برای mode area و تعاریف آنها در نسخه های بعدی Band SOLVE تغییر خواهد کرد. آنها اصولاً باید به عنوان ابزارهای تشخیصی مطرح شوند برای استخراج کردن مودهای جالب توجه نسبت به کمیتهای بسیار مفید فیزیکی.

- Parity

BandSOLVE می تواند Parity هر مد را در طول جهت های X، Y یا Z اندازه گیری کند. مقدار Parity به عنوان مقدار امید عملگر آیینه ای مناسب تعریف می شود. برای مثال، اگر $\hat{\mathbf{M}}_x$ عملگر آیینه ای در جهت X باشد و |Hm> حل ویژه برای مود m باشد، سپس X-parity به صورت زیر تعریف می شود

$$\text{X-parity} = \langle H_m | \hat{M}_x | H_m \rangle$$

Parity در رنج[۱ و ۱-] قرار می گیرد. مدهای زوج دارای زوجیت ۱ و مدهای فرد دارای زوجیت۱- هستند. توجه کنید که به طور کلی مدهای زوج و فرد می تواند فقط وجود داشته باشد اگر ساختار واقعاً بازتاب متقارن را در جهت انتخاب شده را نشان دهد.

- Polarization fraction

این دو خصوصیت سه بردار است که بخشی از میدانهای **H** و **E** را در جهت هریک از مؤلفه های x،y و z اندازه می گیرد. بنابراین اگر

$$\langle F_x \rangle = \int_{domain} d^3x \, |F_x|^2$$

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \int_{domain} d^3x \, |F_x|^2 + |F_y|^2 + |F_z|^2)$$

کمیتهای محاسبه شده عبارتند از:

$$\left[\frac{\langle H_x \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}, \frac{\langle H_y \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}, \frac{\langle H_z \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}\right] \text{و} \left[\frac{\langle E_x \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}, \frac{\langle E_y \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}, \frac{\langle E_z \rangle}{\langle \mathbf{E} \rangle}\right]$$

- McIsaac fiber mode class

این اندازه گیری فقط برای کاربرانی که در مورد ساختارهای میکروسکوپی یا فیبرهای نوری کریستال فوتونی کار می کنند مفید است. مؤلفه های طولی از هر مود فیبر بررسی می شود تا کلاس تقارن ویژه تعیین شود که به کدام متعلق است. توجه کنید که برای تعیین کردن گروه تقارن ضریب شکل واقعی برای اینکه دسته بندی امکان پذیر شود ضروری است. بنابراین اگر فیبر کریستال فوتونی شش ضلعی متعلق به گروه C_{6v} باشد، گروه تقارنیکه باید وارد شود مانند 6+. اگر ساختار تقارن آیینه ای نداشته باشد مرتبه تقارن چرخشی باید به صورت عدد صحیح منفی وارد شود.

Auxiliary

جدول خصوصیات Auxiliary پنجره خروجی ایجاد توابع تشخیصی مفید متعدد را کنترل می کند:

- Summarize index profile

این گزینه یک فایل <prefix>_index.dat تولید می کند که شامل برخی اطلاعات اساسی درباره ضریب شکل از قبیل ماکزیمم، مینیمم و مقادیر ضریب متوسط می باشد.

- KPath output

برای هر محاسبه، kpath کامل می تواند برای یک فایل متنی نوشته شود که نامش <prefix>.kpth, است. این مفید است به عنوان یک تشخیص ولی می تواند همچنین برای ساختن و ویرایش فایل های kpath بهبود داده شده برای دست یابی مسیرهای غیراستاندارد مفید باشد.

Units

جدول Units مقیاس فرکانس را برای مقادیر ویژه در ساختار باند اندازه گیری می کند. معنی گزینه ها در جدول زیر نشان داده شده است:

Omega	$\omega = 2\pi c / \lambda$	Rad/s
Nu	$\nu = c / \lambda$	Hz
Nu/c	$\nu / c = 1 / \lambda$	1/micron
K0	$k_0 = \omega / c = 2\pi / \lambda$	1/micron
Nu*a/c	$\nu a / c = \omega a / 2\pi c = a / \lambda$	بدون بعد
K0 a	$k_0 a = 2\pi a / \lambda$	بدون بعد

اینجا a یک مقیاس طولی نمونه برای مسأله است که توسط **Scale Length** جدول تنظیم می شود. مقدار پیش فرض Period است که با طول ضلع سلول واحد مطابقت دارد، برای ساختارهای تولید شده با ابزارهای رسم کردن. این می تواند تغییر کند اگر نیاز باشد.

Plotting

جدول Plotting شامل تعدادی از ویژگی ها است که نتیجه ظهور نمایش ساختارهای باند، ناحیه های بریلیون و شکلهای مود است.

- lattice repetitions

موقع نمایش مودها، نتایج معمولاً آسان تر است برای تفسیر اگر دوره های تناوب متعدد ارائه شود. این ها تعیین تعداد تکرار را در طول هر بردار شبکه کنترل می کند. مقادیر ۲ یا ۳ در جهت معمولاً نمایش خوش آیند را به دست می دهد.

- Show ranges for bands and gaps in scan plots

به صورت پیش فرض، شکلهای باند و شکاف در طی بررسی محاسبات کشیده شده با میله های عمودی تعیین کننده اندازه هر باند تولید می شوند. متناوباً اگر این گزینه غرفعال شود، نقشه باند توسط کشیدن هر مقدار ویژه به صورت نقطه رسم می شود. این می تواند حاوی اطلاعات مفید باشد ولی برای بررسی های طولانی با مقادیر ویژه زیاد رسم ممکن است کند شود در موردی که این گزینه باید دوباره فعال شود.

توجه کنید که نقشه های شکاف رسم نمی شوند اگر گزینه غیرفعال باشد.

- Show reciprocal lattice point in BZ diagrams

وقتی این گزینه انتخاب می شود، نمودار BZ شامل نقطه چین های سیاه است که موقعیت نقاط شبکه هم پاسخ نزدیک را علامت گذاری می کند.

- Add WinPLOT commands in this file to bandstructure

این میدان به یک فایل شامل دستورات WinPLOT اجازه می دهد که پذیرفته شود. محتوی فایل به نمایش ساختار باند اضافه می شود. این می تواند برای اضافه کردن خطوط یا نشانگرها در نقاط مهم استفاده شود. این گزینه فقط برای WinPLOT است.

Filters

در محاسبات درگیر با زیر لایه ها، برای مثال لایه های کریستال فوتونی، این مفید است برای فیلتر کردن مدها برای جابجا کردن آنها درخارج **light lines** قرار گرفته اند. این با تنظیمات جدول Filters امکان پذیر است.

Logging

پیشرفت شبیه سازی در فایل log ذخیره می شود، یا(روی سیستم یونیکس/ لینوکس) روی خروجی استاندارد نوشته می شودس. تنظیمات در جدول Logging مقصد و اندازه log را کنترل می کند. این عادی است که فقط از بهره اگر محاسبات همگرا نشوند،(در آن صورت شما باید مشکل را به RSoft گزارش دهید.)

فصل ۸ محاسبات ساختار باند FDTD استفاده شده در FullWAVE

هنگامی که پیاده سازی موج صقحه ای استفاده می شود توسط پیش فرض در BandSOLVE سریع، دقیق و مناسب است، آن محدودیتهای معین، ناتوانی قابل ملاحظه ای در از بین بردن تلفات، پراش یا مواد فلزی دارد. برای خریداران FullWAVE، BandSOLVE محاسبات ساختار باند استفاده شده در روش حوزه زمان تفاضل محدود[1] پشتیبانی می کند ، که می توان از این محدودیتها با مصرف زمان شبیه سازی طولانی تر و کاهش اطلاع از خواص مود دوری کرد . این روش در این فصل توضیح داده می شود.

نکته: کاربرها باید license برای FullWAVE را برای استفاده ویژگیهای شرح داده شده در این بخش داشته باشند. به غیر از مشتریان FullWAVE علاقه مند به تأثیرات فلزی یا متفرق کننده ممکن است با RSoft برای بدست آوردن ارزیابی کپی FullWAVE تماس بگیرند.

۸-۱ معرفی

ابزار FullWAVE گروه طراحی RSoft یک حل کننده FDTD نیرومند است که می تواند تلفات، پراش، غیرخطی و فلزات را مدل می کند. برای بیشترین عملکرد انتشار روش FDTD، ما به طور نمونه مرز شفاف یا جاذب معروف به پیاده سازی Perfectly Matched Layer(PML) را استفاده می کنیم. اگرچه، FullWAVE همچنین توانایی به کار بردن شرایط مرزی پریودیک را دارد.

این کلیدی است برای کاربرد روش FDTD برای محاسبات ساختار باند. در واقع، FullWAVE شرایط مرزی مخلوط را پشتیبانی می کند ، که بعضی مرزها متناوب هستند و بقیه جاذب، و مخصوصاً می تواند برای مطالعه روش های راهنما در یک صفحه PC، جایی که حالت تناوبی در صفحه وجود دارد مفید باشد، به جز محیط باز بالا و پایین صفحه. در این شرح ما تکنیکهای عددی را توضیح می دهیم که یک ساختار باند از FullWAVE استخراج می کنیم و سپس یک سری از مثالها را به صورت خودآموز شرح می دهیم.

[1] Finite-Difference Time-Domain

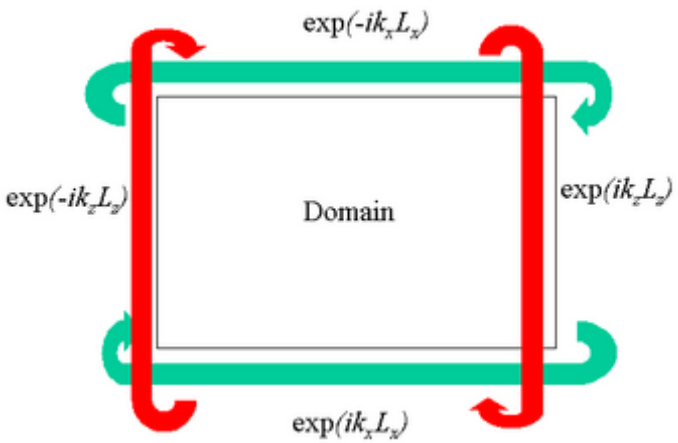
۸-۲ تکنیک عددی

هنگام استفاده BandSOLVE در روش FDTD، بسیاری از محاسبات اساسی از دید استفاده کننده پنهان می شود و تنظیمات پیچیده پارامتر برای FullWAVE، به طور اتوماتیک به وسیله موتور BandSOLVE انجام می شود. با این حال، برای فهمیدن امکانات و محدودیتها به شیوه FDTD، مهم است داشتن فهم از چیزی که در پشت مراحل می گذرد.

۸-۲-۱ شرایط مرزی متناوب در FDTD

اولین مرحله در کاربرد الگوریتم FDTD برای ساختارهای باند معرفی کردن شرایط مرزی متناوب[1](PBC) در روش موج صفحه ای، PBC به طور اتوماتیک شامل تمام انتخاب توابع پایه ای پریودیک است. در شبیه سازی FDTD، ما باید دقیقاً PBC را به حساب بیاوریم. یک عنصر میدان الکترومغناطیسی که حوزه شبیه سازی را ترک می کند، مجبور می شود به بازگشت حوزه از دیوار مخالف با تغییر فاز مناسب که بستگی به ابعاد ساختار و وضعیت جاری در ناحیه بریلیون دارد.

دیاگرام در شکل ۱ را ملاحظه کنید. در این حالت، ما حوزه 2D داریم به طولهای Lx و Lz و می خواهیم شرایط مرزی پریودیک را برای نقطه **K**(Kx,0,Kz) به کار ببریم. تغییرات فاز متناظر در مجاور بردارها نشان داده شده است.



شکل ۸-۱ شرایط مرزی متناوب در محاسباتFDTD

[1] Periodic boundary conditions

در FullWAVE، شرایط مرزی پریودیک با تنظیمات fdtd_bc_z, fdtd_bc_y, fdtd_bc_x برای مقدار FDTD_BC_PERIODIC فعال می شود. تغییرات فاز در هر راستا با متغیرهای fdtd_bc_kax، fdtd_bc_kay و fdtd_bc_kaz تنظیم می شود. همچنانکه اسامی آنها نشان می دهد، آنها حاصلضرب طول ضلع حوزه و مؤلفه بردار موج در آن جهت را بیان می کند. در عمل، بندرت، باید خودمان این مقادیر را تغییر دهیم، در FullWAVE، BandSOLVE به طور اتوماتیک مقادیر آنها را در کل ناحیه بریلیون مشخص می کند.

توجه کنید که در شکل ۱، ما مختصات XوZ را برای محاسبات 2D استفاده کنیم. FullWAVE شبیه سازی 2D را در صفحه X-Y پشتیبانی نمی کند. ولی این بندرت مشکل ساز می شود. اما، اگر شما انتظار دارید که بین محاسبات plane wane و FDTD انتخاب کنید، ایده بهتر این است که طرح را بکشید و ساختار را در جهت X-Z ترسیم کنید.

۸-۲-۲ پاسخ فرکانسی

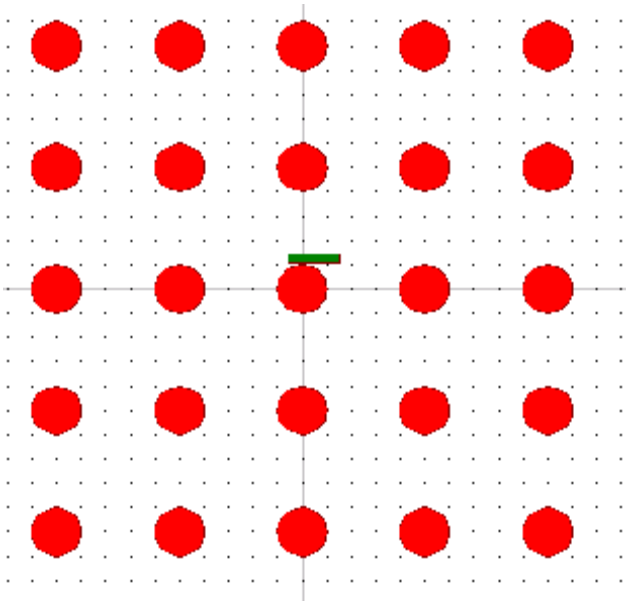
برای هر مقدار بردار موج **k** kpath، زمان FullWAVE کامل باید انجام شود با تغییرات فاز شرایط مرزی مناسب همان طور که توضیح داده شده است.(به یاد داشته باشید که شروع همه این شبیه سازیهای FullWAVE به صورت اتوماتیک به وسیله BandSOLVE انجام می شود). اکنون ما نیاز داریم که اطلاعات باند را از FullWAVE استخراج کنیم. بیاد آورید که در روش PWE، الگوریتم هر باند را با کمینه سازی و متعامدسازی حالت های ویژه پی در پی زمان هارمونیک فرض شده وابسطه به هر باند پیدا می کند . در روش FDTD، همه باندها را در **K**point منفرد همزمان می یابیم. باندها منطبق بر پیک های پاسخ فرکانس سیستم است.

برای مشخص شدن بیشتر، ما یک سلول را با منبع متمرکز شده از قبیل توزیع گوسین[1] باریک یا تابع دلتا[2] تحریک می کنیم. رنج وسیعی از فرکانس های فضایی در این منبع با رنج بزرگی از فرکانس های گذرا چنانکه میدان در زمان باز شود مطابق است. محتوی فرکانس واقعی که ظاهر می شود با شرایط مرزی کاربردی سازگار است. برای بدست آوردن پاسخ یک مانیتور زمان را در نقطه تقارن پایین در سلول واحد معرفی می کنیم و دامنه میدان را به عنوان تابع زمان بازبینی می کنیم. پیکها در طیف مانند فرکانس های ویژه هر باند تعیین و ثبت می شوند.

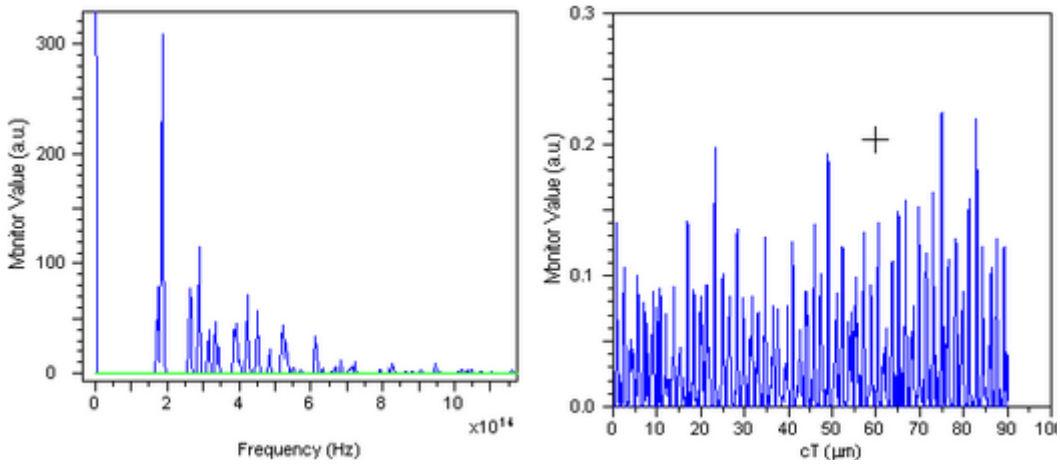
این ایده ها در شکل های زیر مشاهده می شود. شکل ۲ شبکه فضایی 2D ساده را نشان می دهد. مانیتور زمان در مبدأ قرار گرفته است. وقتی انتشار منفرد اجرا می شود، مانیتور زمان یک پاسخ شبیه شکل ۳ ارائه می دهد که به طیف شکل ۳b تبدیل می شود. الگوریتم یافتن پیک برای استخراج حالت های ویژه رزنانس استفاده می شود.

---

[1] Gaussian
[2] Delta-function



شکل۸-۲ طرح CAD برای محاسبات FDTD



شکل۸-۳ مانیتور زمان و پاسخ طیفی از محاسبات FDTD

۸-۲-۳ رزولوشن فرکانسی و باندهای تقریباً- تبهگن

به وسیله روش PWE اطلاعات شبکه که فقط باید تعیین شود روزلوشن فضایی است. برای شبیه سازی FDTD باید اندازه مرحله زمانی و طول انتشار را معین کنیم. طول انتشار رزولوشن طیف فرکانس نهایی را مشخص می کند. رزولوشن باید برای حل با دقت باندهای فاصله دار به اندازه کافی کوچک باشد.هیچ راهی برای BandSOLVE وجود ندارد که بفهمد کدام تقسیم بندی نمونه است، بنابراین رزولوشن باید توسط کاربر تنظیم شود.

حتی با رزولوشن بالا، در نقاط تقارن مرز بریلیون باندهای ویژه تبهگن می شود در آن نقاط، طیف با FullWAVE بدست می آید که فقط شامل یک پیک است، بنابراین فقط یک مقدار مشخصه ثبت می شود. بنابراین در نقاط متفاوت ساختار باند، همان باندها به صورت متفاوت طبق درجه تبهگنی شماره گذاری می شود. سرانجام این یعنی که وقتی روش FDTD می تواند فرکانس رزنانس منحصر به فردی در هر نقطه k پیدا کند، آن نمی تواند تعیین کند وقتی یک شکاف باند وجود دارد. شکاف های باند باید به راحتی با چشم مشاهده شود.

۸-۲-۴ خصوصیات مود

همه محاسبات استفاده کننده روش PWE فقط مقدار ویژه هر باند را مشخص نمی کند، بلکه تابع ویژه مود فضایی برای آن حالت را نیز مشخص می کند. این ما را به محاسبات بسیاری از کمیت های تشخیصی پشتیبانی شده در BandSOLVE مثل سرعت گروه، حوزه مود، یا Parity توانا می سازد. در روش FDTD محاسبات پایه ای فقط مقدار ویژه باندها را فراهم می کند. یافتن میدانهای فضایی حالات ویژه، نیازمند محاسبات اضافی است.

به عنوان نتیجه، اندازه های خصوصیات مود در روش FDTD از BandSOLVE در دسترس نیست.

۸-۲-۵ محدودیت های جاری محاسبات باند FDTD

محدودیتهای مختلفی برای استفاده روش FDTD برای محاسبه باندها وجود دارد. اولین، این است که محاسبه مودهای ساختار بدون تلاش زیادی مشکل است.

دومی، پس از N_{eff}، اندازه گیری های بعدی در کد PWE در دسترس است و برای بخش FDTD در دسترس نیست.

بالاخره، چون FullWAVE نمی تواند باندهای تبهگن را نمایان کند، این روش نمی تواند خطوط شکاف باندها را بکشد. این به دلیل آن است که FullWAVE نمی تواند بیبن یک باند و باند دیگر را تشخیص دهد.

۸-۳ خودآموز : ساختارهای باند ساده در FullWAVE

این خودآموز ما را با فهم پایه ای تکنیک FDTD برای یافتن ساختار باند آماده می سازد و برخی قابلیت های PWE را نشان می دهد.

روال اصلی در زیر آمده است:

ساختار پریودیک را از طریق طرح CAD معین کنید.(مستقیماً یا از طریق یکی از امکانات تولید آرایه اتوماتیک)

نوع میدان مانیتور زمان را تعیین کنید و مکان مانیتور در سلول واحد ولـی دور از همـه نقـاط تقـارن تعیین کنید.

منبع را خارج از نقاط تقارن قرار دهید و اندازه منبع را به طور مناسب تعیین کنید.

پارامترهای شبیه سازی BandSOLVE را وارد کنید.

زمان توقف را برای طولانی بودن کافی برای دستیابی به رزولوشن مناسب تنظیم کنید.

پارامترهای دیگر شبیه سازی عددی را در صورت نیاز تنظیم کنید.

محاسبات باند را اجرا کنید.

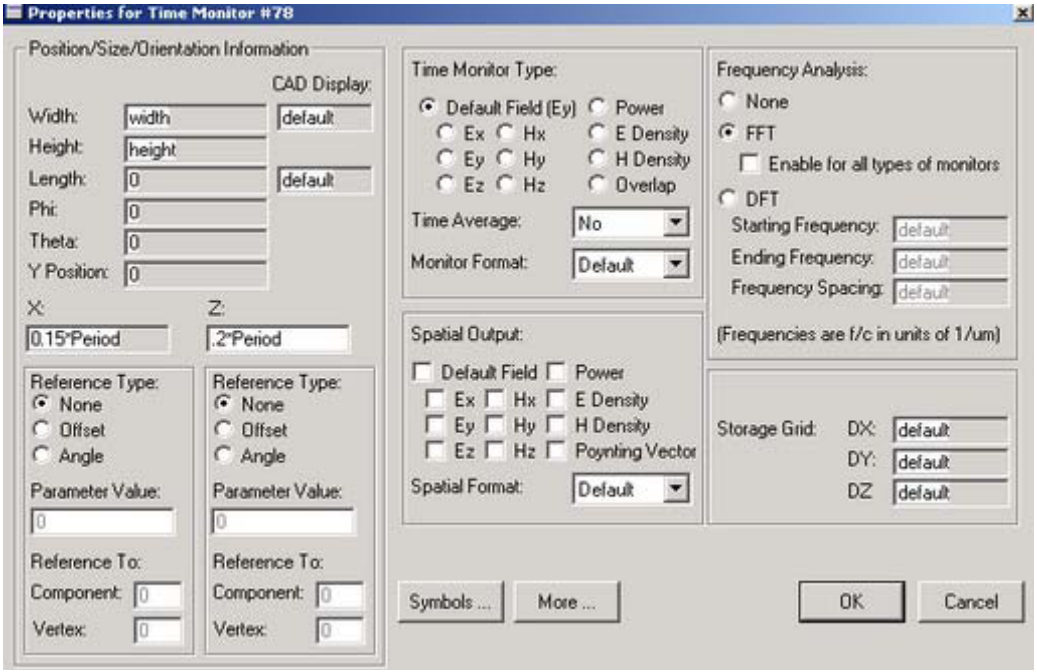
بعد از محاسبات که با شبکه مربعی انجام شده است ، محاسبات با شبکه شش ضلعی را بررسـی مـی کنیم که شامل برخی ظرافت های بیشتری است.

۸-۳-۱ نصب ساختار PBG مربعی برای محاسبات FDTD

این بخش از تمام مراحل پایه ای برای تنظیم ساختار بـرای محاسـبات FDTD در CAD عبـور مـی کند. ما یک شبکه PBG مستطیلی 2D، ساده برای این حالـت و محاسـبات سـاختار بانـد آن تنظـیم خواهیم کرد.

استفاده از ابزار طرح آرایه XZ، رسم شبکه مربعی با شکل های دایره ای و Period=1 و فایل tut.14 را فراخوانی کنید. اندازه شبکه تا زمانی که ما با یک سلول واحد کار می کنیم مهم نیست.(توجـه کنیـد که آرایه XY را نمی توانیم استفاده کنیم زیرا محاسبات 2D FullWAVE فقط در صـفحه XZ مـی تواند انجام می شود.)

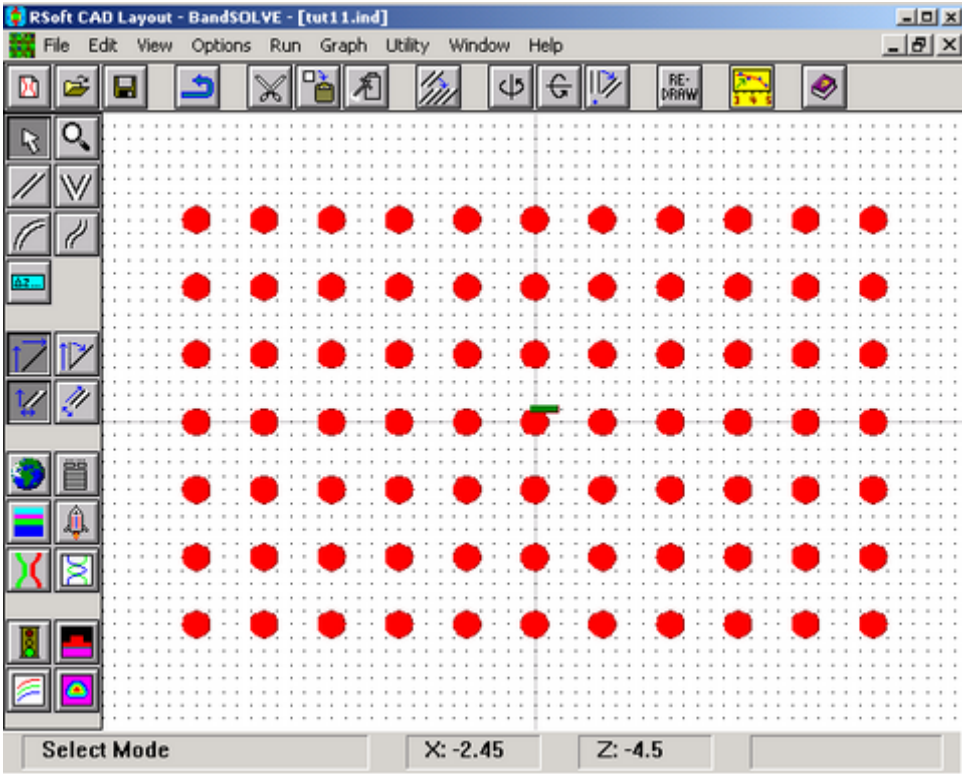
سپس ما time monitor را قرار می دهیم. از CAD menubar، **Options/ Insert/ Time Monitor** را انتخاب کنید. خصوصیات که برای Time monitor ظاهر می شود در زیر دیده می شود.



شکل ۸-۴ Time monitor

برای موقعیت های X و Z، 0.15*period و 0.2*period را وارد کنید.برای بازگشت به CAD **OK** کنید.

موقعیت time monitor در اولین سلول واحد ساختار پریودیک که تعریف کرده ایم تنظیم نموده ایم. همچنین ما انتخاب های پیش فرض میدان time monitor را پذیرفته ایم. پنجره CAD باید به صورت زیر باشد:



شکل۸-۵ شبکه مربعی

۸-۳-۲ تنظیم شرایط اجرا

اکنون به تنظیم شرایط شروع نیاز داریم این باید به بسیاری از مودها اجازه دهد که به صورت درست در حوزه شبیه سازی برانگیخته شوند.(همیشه ممکن است برای برانگیختن یک یا دو مود بدشانس باشیم).

مطمئن شوید که روش شبیه سازی BandSOLVE در Global Settings تنظیم شود و به CAD اصلی بازگردید.

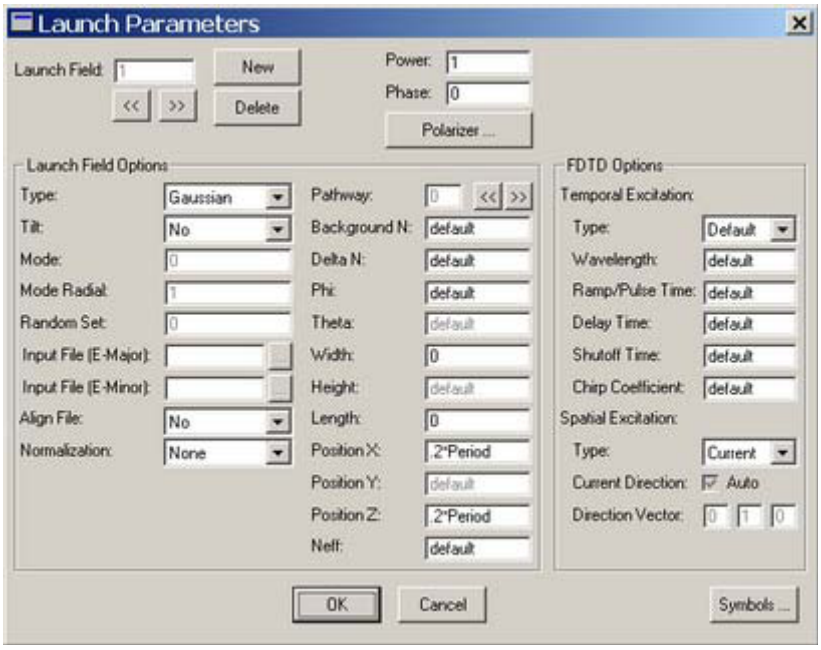
آیکون Edit launch Field (rocket ship) را فشار دهید.

Launch Position X=0.2*Period, **Launch offset Z**=0.8*period را تنظیم کنید. توجه کنید این مکان یک چهارم سمت راست بالایی یک سلول واحد است. این برای شبکه مربعی نیاز نیست ولی موقع کار کردن با شبکه شش ضلعی مهم است.

Spatial Excitation Type روی Current تنظیم کنید. این میدان اجرا را به منبع نقطه ای تنظیم می کند.

پهنای منبع با option **Source Width** تنظیم می شود. این پارامتر را روی 0 تنظیم کنید، انتخاب **Source Width**=0 نقطه ایده آل منبع را نشان می دهد و نتایج در یک رنج وسیعی از فرکانس های برانگیخته را بدست می آید.

شرایط اکنون باید مثل زیر باشد:



شکل۸-۶ Launch Parameters

۸-۳-۳ انتخاب بقیه تنظیمات FDTD

اکنون پارامترهای مختلف دیگری برای تنظیم کردن در FDTD وجود دارد.

Perform Simulation را برای رفتن به پنجره شبیه سازی BandSOLVE فشار دهید. **Sim Method** را روی FDTD انتخاب کنند پس **FDTD Setting** را فشار دهید.

این پنجره برخی از کنترل های بسیار مهم FullWAVE را که عموماً باید از پنجره شبیه سازی FullWAVE تنظیم شود را دوباره می سازد. این پارامترها برای سادگی دوباره در BandSOLVE تنظیم می شود.

شرایط مرزی در هر جهت برای Periodic تنظیم کنید. این انتخاب درستی برای بیشتر محاسبات ساختار باند با FullWAVE است.

برخلاف روش PWE، شبیه سازی FDTD واقعاً در زمان انجام می شود. شبیه سازی پاسخ زمانی سیستم را ثبت کرده و سپس پاسخ فرکانس را با کمک تبدیل فوریه محاسبه می کند. هنگام محاسبه تبدیل فوریه، پهنای شبیه سازی بیشترین رزولوشن طیف را مشخص می کند. در اضافه، هنگامی که FFT انجام می شود، با این متغیر را روی توان دو تعداد نقاط تنظیم خواهیم کرد. رزولوشن فرکانس مانیتور زمان با رابطه زیر کنترل می شود:

$$\Delta f = \frac{1}{N\,\Delta t}$$

که Δf رزولوشن فرکانس، Δt، رزولوشن نمونه برداری و N تعداد نمونه های زمان است. رزولوشن نمونه برداری تا درجه زیادی با پایداری و دقت معیارها تعیین می شود. از تجربه ما با شبیه سازی FDTD استاندارد، ما می دانیم که Time step Δt با متغیر fdtd_time_step نشان داده می شود. اولین انتخاب درست در مسایل بسیاری grid_size/2 است. در ساختارهای پیچیده، پراش یا فرکانس پهن نتیجه آزمایش ما را به مقدار کمتر هدایت می کند. در مورد کنونی انتخاب grid_size/2 خوب است.

هنوز در تنظیمات Time step= grid_size/2 تنظیم کنید.

اکنون ما زمان توقف را بر اساس زولوشن فرکانس مورد نیاز انتخاب می کنیم. در پیش رفت، ما به درستی رزولوشن مورد نیاز را نمی توانیم پیش بینی کنیم. در عوض، با تخمین قابل قبولی برای رزولوشن مورد نیاز همچنان که در زیر می آید شروع می کنیم:

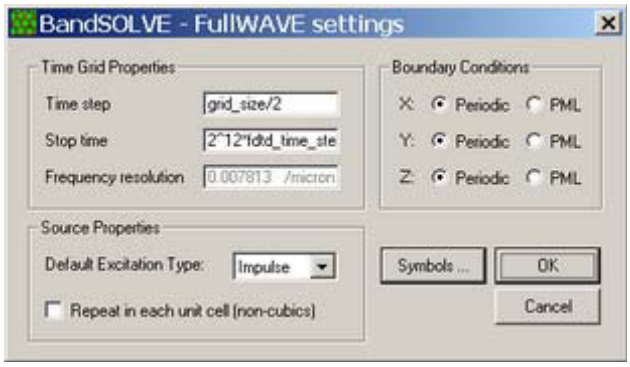
با روش PWE امتحان کنید که به ما می آموزد که فرکانس نرمالیزه $\bar{\nu} = \omega a/(2\pi c) = a/\lambda$ مقیاس فرکانسی قابل قبول برای مسائل ساختار باند است. ساختار به طور نمونه برای باندهای یک تا ده بالای رنج فرکانس نرمالیزه شده نشان می دهد که $\Delta\bar{\nu} = 1$. بنابراین رزولوشن فرکانسی برای شروع $\Delta\bar{\nu} = 0.002$ انتخاب قابل قبولی است. اگر بخواهیم می توانیم این رزولوشن را با فاکتور مقدار میانی index profile کم می کنیم. بنابراین رزولوشن فرکانسی درست برابر است با $\Delta\nu = 0.0020 \times 2\pi c/a = 3.77e^{12}$ HZ یا $\Delta\nu/c = 0.126/microns$ تعداد مراحل زمانی مورد نیاز با رابطه زیر داده می شود

$$N = \frac{1}{\Delta\nu\Delta t}$$

که با grid_size=Period/16=0.03125 پیش فرض N=2546 داده می شود. گرد کردن به سمت بالا توان ۲ بدست می آوریم $N=2^{12}=4096$.

در پنجره تنظیمات FullWAVE برای BandSOLVE، **StopTime** روی 2^12*fdtd_time_step تنظیم کنید.

پنجره اکنون باید به شکل زیر باشد:



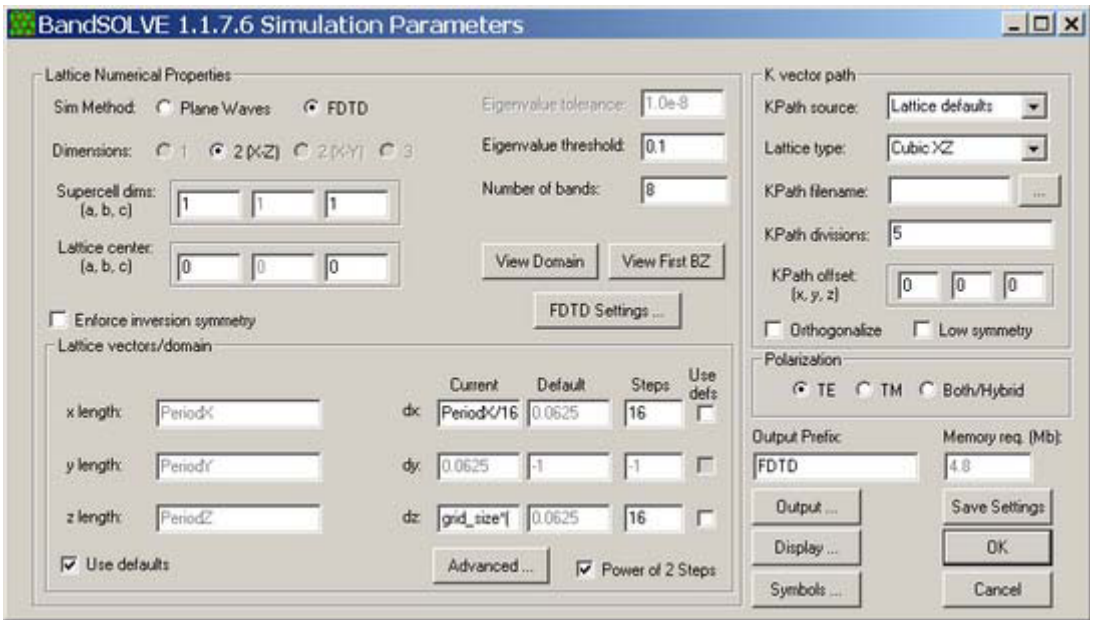
شکل ۱۰-۷ FullWAVE settings

توجه کنید که پنجره همیشه رزولوشن فرکانسی را نشان می دهد که در انتخاب طول مدت مفید است. برای این حالت،رزولوشن 0.007813/micron با رزولوشن $\Delta\nu = 2.34e^{12}Hz$ مطابق است که انتظار می رفت، که کمی از شرایط اصلی کمتر است.

Ok کنید تا به پنجره BandSOLVE اصلی بازگردید.

۸-۳-۴ اجرای محاسبات باند

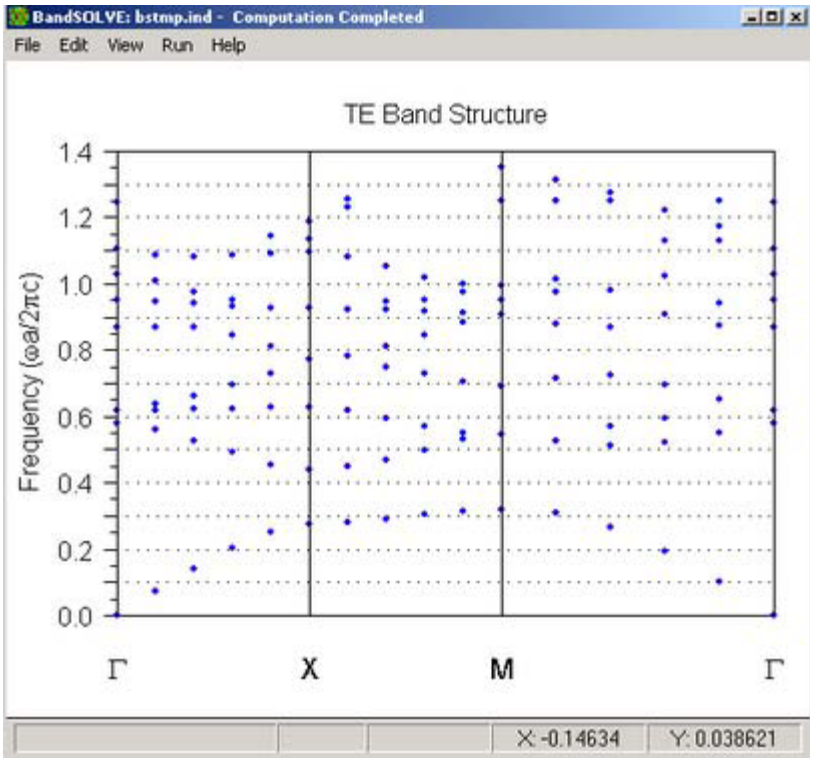
اکنون برای انجام محاسبات باند FDTD آماده ایم. در پنجره اصلی مطمئن شوید که همه تنظیمات مثل زیر است:



شکل ۸-۸ BandSOLVE dialog

در آخر، برای انجام محاسبات **ok** کنید.

همچنانکه، شبیه سازی در حال انجام است، پنجره شبیه سازی FDTD کل نقاط k را اسکن می کند و فرکانس های ویژه از پاسخ زمانی استخراج می شود که به صورت دوره ای در پنجره ساختار باند اصلی به روز می شود. در انتهای شبیه سازی، نتایج باید به صورت زیر باشد:



شکل ۸-۸ ساختار باند

تنظیمات اضافه

تعداد میدان باندها، تعداد پیکها را که از طیف فرکانسی استخراج می شود را نشان می دهد. **Eigenvualue threshold** یک پیک چقدر باید بزرگ باشد را نشان می دهد . تنظیمات پیش فرض ۱٪ را نشان می دهد که پیک طیفی باید بزرگ تر از ۱٪ بلندترین پیک برای مود ثبت شده باشد. اگر ساختار باند نهایی نقاط از دست داده را نشان دهد. آن می تواند برای افزایش تعداد باندها با کاهش eigenvalue threshold مفید باشد.

۸-۳-۵ ساختار باند شبکه غیرمکعبی استفاده کننده FDTD

به وسیله روش PWE در واقع تفاوتی بین روش کار برای شبکه های مکعبی و غیرمکعبی وجود ندارد. با روش FDTD این زیاد درست نیست، از آنجایی که FullWAVE فقط شبیه سازی روی حوزه مستطیلی را پشتیبانی می کند. بنابراین برای ساختارهایی با سلول واحد غیرمکعبی مثل آرایه شش ضلعی، ما باید دوباره شرایط مرزی پریودیک غیرمکعبی را به شبکه مکعبی تصحیح کنیم.

در این مثال، این مسأله را برای ساختارهای استاندارد دیگر آرایه شش ضلعی 2D بررسی می کنیم. بسیاری از روش ها از آرایه مربعی تغییر نمی کند.

طرح شش ضلعی را با استفاده از Array Layout XZ بسازید ، و سپس Radius= .48*Period , background_index=sqrt(13) و delta=1-background_index تنظیم کنید.

Time Monitor وارد کنید و در وضعیت X و Z را به -0.21*Period و 0.17*Period به ترتیب تنظیم کنید. همچنین مطمئن شوید که نوع Time Monitor روی Default Field time **without** averaging,(Ey) تنظیم شده باشد.

global setting را برای انتخاب شبیه سازی BandSOLVE استفاده کنید. و سپس پنجره اصلی BandSOLVE را باز کنید.

تنظیمات شروع برای شبکه شش ضلعی

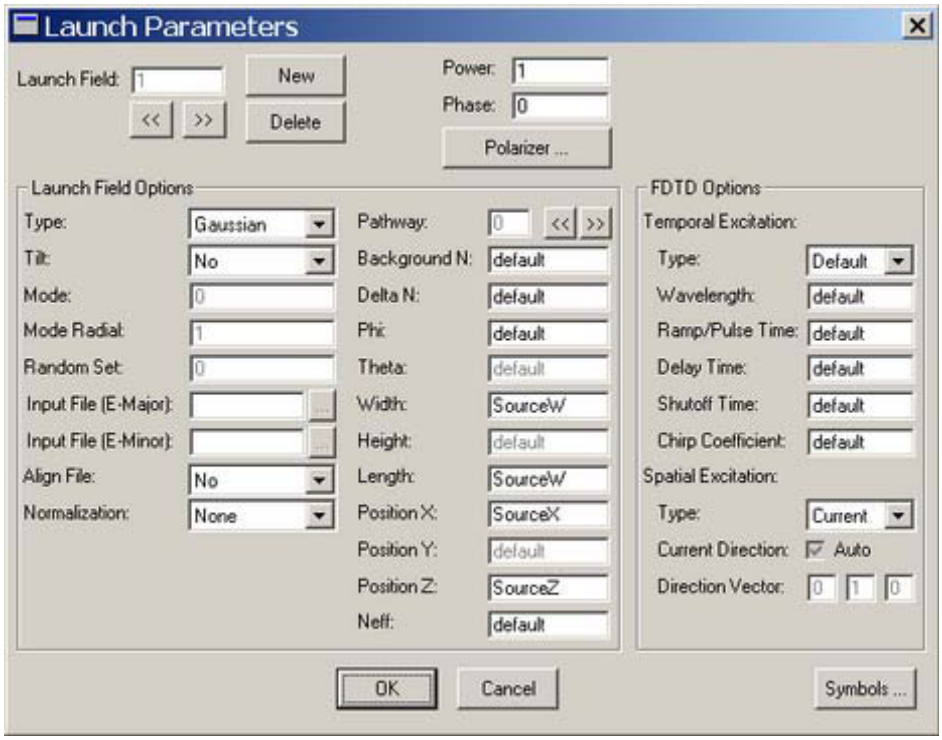
قبل از تنظیم پارامترها، به symbol table پروید و متغیرهای زیر را بسازید و تنظیم کنید.

Sourcew = 0.2*Period

Sourcex = 0.22*PperiodX

Sourcez = 0.18*PeriodZ

سپس به CAD برگردید و آیکون **Edit Launch Field** را فشار دهید و به پنجره lanch parameters بروید. تنظیمات را مثل زیر درست کنید.



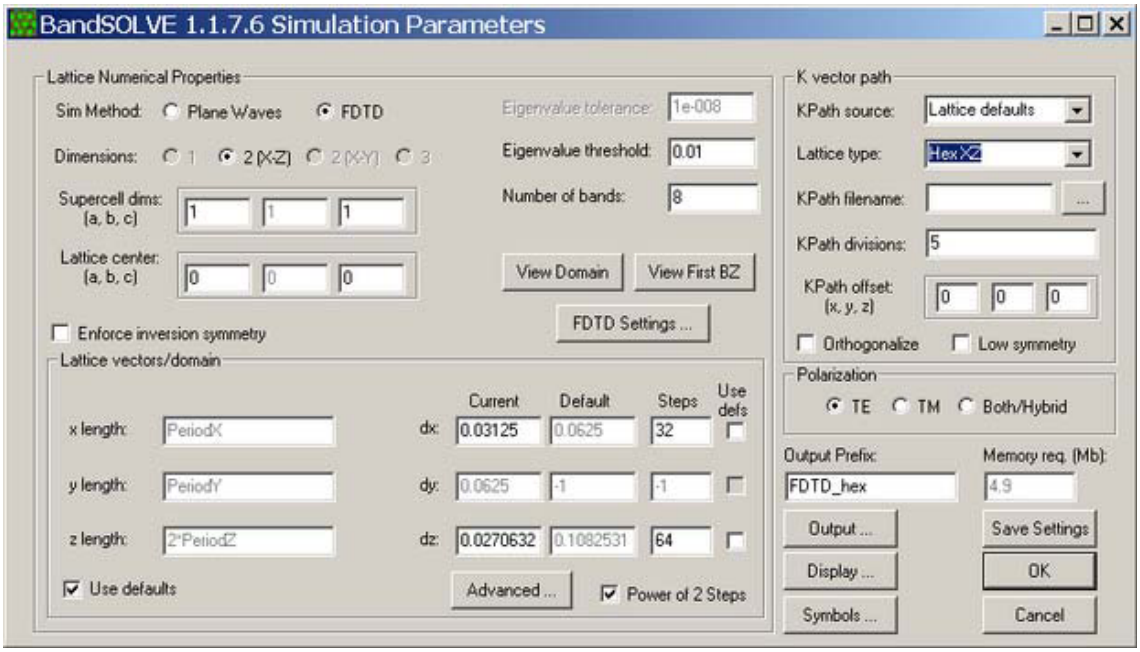
شکل ۸-۹ Launch Parameter

به این نکته توجه کنید که ما launched field را در بالا سمت راست قرار داده ایم.

Ok کنید تا به CAD بازگردید.

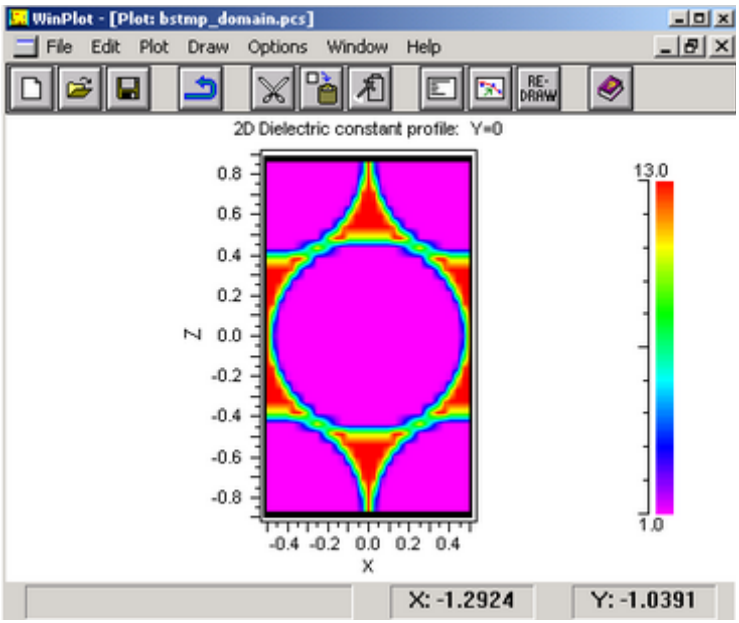
پارامترهای شبیه سازی برای شبکه شش ضلعی

آیکون **Perfom Simulation** را فشار دهید. تنظیمات را مثل زیر درست کنید:



شکل ۸-۹ BandSOLVE

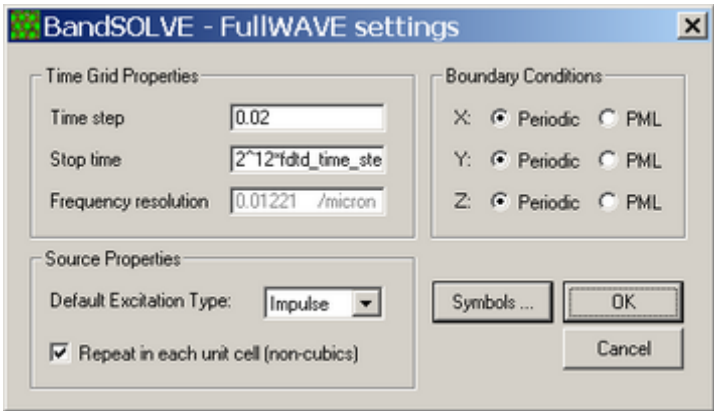
تغییرات **Sim Method** را روی FDTD و **X Steps** و **Z** را روی 32 و 64 تنظیم می کند. توجه کنید که length پیش فرض راستای Z، که تنظیم شده با array layout برابر است با 2*Periodz این اولین تفاوت با حالت مکعبی است. برای فهمیدن **View Domain** را فشار دهید. تا توزیع شاخص را برای شبیه سازی ببینید:



شکل ۸-۱۰ View Domain

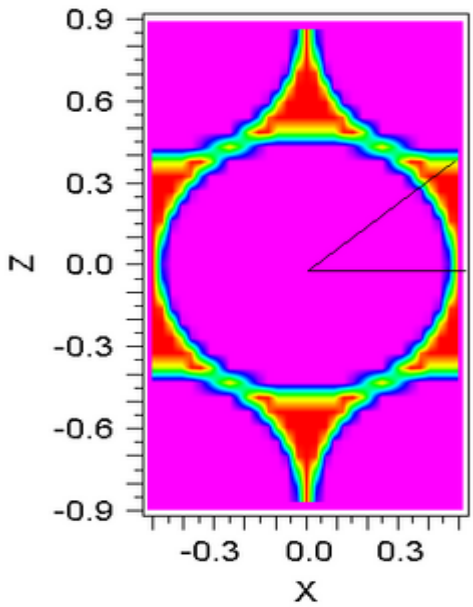
۸-۳-۶ پارامترهای FDTD شبکه شش ضلعی

اکنون **FDTD Settings...** را برای تنظیم پارامترهای FullWAVE مثل آنچه که در زیر نشـان داده شده فشار دهید:



شکل ۸-۱۱ FullWAVE setting

Stoptime برای دستیابی به رزولوشن فرکانس مناسبانتخاب شده است. نکته بعدی تکرار هـر سـلول واحد(غیرمکعبی) است که چک شده است.

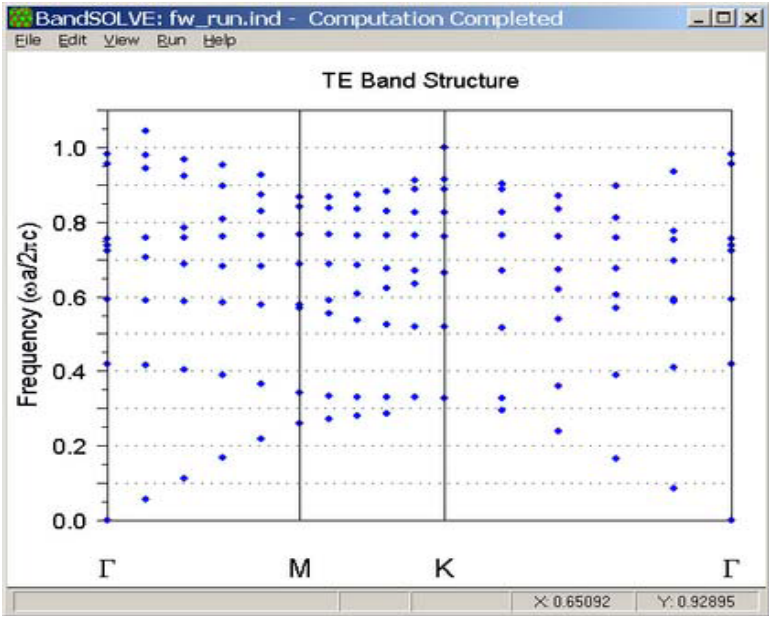


شکل ۸-۱۲

OK کنید تا به پنجره اصلی برگردید.

۸-۳-۷ شبیه سازی مثال FDTD شش ضلعی

بعد از تنظمیات **ok** کنید. در انتها دیاگرام زیر را می بینید.



شکل ۸-۱۳ ساختار باند

روشن است که روش FDTD بسیار کندت است نسبت به روش PWE ،این یکی از بسیار دلایلی است که روش PWE انتخاب اول ما است اگر پراش مورد نیاز نباشد.